

Hybride numerische Simulation von Verbrennungslärm und thermoakustischen Instabilitäten in technischen Verbrennungssystemen

Vom Fachbereich Maschinenbau
an der Technischen Universität Darmstadt
zur
Erlangung des Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte

D i s s e r t a t i o n

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Timo Christian Klenke

aus Kassel

| | |
|-----------------------------|--------------------------------|
| Berichterstatter: | Prof. Dr.-Ing. J. Janicka |
| Mitberichterstatter: | Prof. Dr.-Ing. C.O. Paschereit |
| Tag der Einreichung: | 02. August 2016 |
| Tag der mündlichen Prüfung: | 15. November 2016 |

Darmstadt 2017

D17

Danksagung

Die vorliegende Dissertation entstand im Rahmen meiner fünfjährigen Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik der Technischen Universität Darmstadt.

Mein Dank gilt daher zuerst Herrn Prof. Dr.-Ing. Johannes Janicka, dem Leiter des Fachgebiets, für die Ermöglichung meiner Promotion, für die mir zugestandenen Freiheiten und für sein Vertrauen in meine Person. Weiterhin danke ich Herrn Prof. Paschereit persönlich für sein entgegengebrachtes Interesse und die Übernahme des Korreferats.

Meinen Kollegen am Fachgebiet danke ich für die Unterstützung und die anregenden Diskussionen als auch für die angenehme Arbeitsatmosphäre, welche das Arbeiten in schwierigen Zeiten sehr viel erträglicher gestaltet hat. Ein großer Dank für die kooperative und freundliche Zusammenarbeit sowie die fachliche Unterstützung geht an Dr.-Ing. Max Stauer, Dr.-Ing. Ruud Eggels und Dr.-Ing. André Fischer von der Firma Rolls-Royce Deutschland als auch an Jürgen Dierke und Dr.-Ing. Roland Ewert vom Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt in Braunschweig. Desweiteren möchte ich Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Kollmann für die weiterführenden, fachlichen Diskussionen danken. Dem Lichtenberg-Hochleistungsrechenzentrum an der TU-Darmstadt möchte ich für die Bereitstellung von Rechenkapazität danken, ohne die eine Ausführung dieser Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Zu guter Letzt möchte ich meinen Eltern und meiner Familie danken für die unermüdliche Unterstützung während meiner Schul- und Studienzeit.

Kassel, im August 2016

Timo Klenke

„Optimisten haben gar keine Ahnung von den freudigen Überraschungen, die Pessimisten erleben.“

(Peter Bamm, Deutscher Arzt und Schriftsteller 1897 - 1975)

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 1.1 | Motivation | 2 |
| 1.2 | Stand der Forschung | 4 |
| 1.3 | Ziel der Arbeit | 7 |
| 1.4 | Struktur der Arbeit | 8 |
| 2 | Turbulente Strömungen | 10 |
| 2.1 | Strömungsmechanische Grundgleichungen | 10 |
| 2.1.1 | Massenerhaltungsgleichung | 12 |
| 2.1.2 | Impulserhaltungsgleichung | 12 |
| 2.1.3 | Speziestransportgleichung | 13 |
| 2.1.4 | Energieerhaltungsgleichung | 15 |
| 2.1.5 | Zustandsgleichung | 17 |
| 2.2 | Strömungen | 18 |
| 2.3 | Beschreibung turbulenter Strömungen | 19 |
| 2.4 | Turbulenzmodellierung | 23 |
| 2.4.1 | Direkte numerische Simulation (DNS) | 23 |
| 2.4.2 | Reynolds-gemittelte-Navier-Stokes-Gleichungen (RANS) | 24 |
| 2.4.3 | Grobstruktursimulation (LES) | 25 |
| 3 | Grundlagen der Verbrennung | 32 |
| 3.1 | Reaktionskinetik und Reaktionsmechanismen | 32 |
| 3.2 | Flammentypen | 34 |
| 3.3 | Verbrennungsmodellierung | 39 |
| 3.3.1 | Flamelet Generated Manifold (FGM) | 42 |
| 4 | Akustik | 47 |
| 4.1 | Akustische Feldgrößen | 47 |
| 4.2 | Schallausbreitung | 49 |
| 4.2.1 | Wellengleichungen | 50 |
| 4.2.2 | Linearisierte Euler-Gleichungen | 52 |
| 4.3 | Thermoakustik | 53 |
| 4.3.1 | Thermoakustische Quellen | 56 |
| 4.3.2 | Vereinfachte thermoakustische Quellen | 58 |
| 4.3.3 | Thermoakustische Instabilitäten | 59 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 5 | Numerische Methoden | 62 |
| 5.1 | Numerische Strömungssimulation | 62 |
| 5.1.1 | Räumliche Diskretisierung | 64 |
| 5.1.2 | Interpolationsverfahren | 65 |
| 5.1.3 | Diskretisierungsfehler | 68 |
| 5.1.4 | Zeitliche Diskretisierung | 69 |
| 5.1.5 | Druck-Korrektur-Verfahren | 70 |
| 5.1.6 | Numerisches Gesamtverfahren | 72 |
| 5.2 | Numerische Akustiksimulation | 72 |
| 5.2.1 | Räumliche Diskretisierung | 73 |
| 5.2.2 | Zeitliche Diskretisierung | 74 |
| 5.2.3 | Numerisches Gesamtverfahren | 75 |
| 5.3 | Kopplungsstrategien | 76 |
| 5.3.1 | Ein-Wege Kopplung | 79 |
| 5.3.2 | Zwei-Wege Kopplung | 79 |
| 6 | Generische Testfälle | 83 |
| 6.1 | Interpolationsschnittstelle | 83 |
| 6.2 | Akustische Berechnung einer eingeschlossenen generischen Brennkammer . | 85 |
| 7 | Turbulente Verbrennungssysteme | 89 |
| 7.1 | Turbulente Freistrahlf Flamme (H3-Flamme) | 89 |
| 7.1.1 | Experimenteller Aufbau | 90 |
| 7.1.2 | Numerischer Aufbau | 91 |
| 7.1.3 | Ergebnisse der hybriden LES/CAA Simulationen | 94 |
| 7.1.4 | Zusammenfassung | 100 |
| 7.2 | Generische Brennkammer | 102 |
| 7.2.1 | Experimenteller Aufbau | 102 |
| 7.2.2 | Numerischer Aufbau | 105 |
| 7.2.3 | Ergebnisse der hybriden LES/CAA Simulationen | 108 |
| 7.2.4 | Thermoakustisch stabiler Fall | 108 |
| 7.2.5 | Zusammenfassung | 112 |
| 7.2.6 | Thermoakustisch instabiler Fall | 112 |
| 7.2.7 | Zusammenfassung | 117 |
| 8 | Zusammenfassung und Ausblick | 119 |
| | Literaturverzeichnis | 121 |

Nomenklatur

Große lateinische Buchstaben

Einheit

| | | |
|---------------------|---|--------------------------------|
| \tilde{P} | Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion | — |
| \tilde{S}_{ij} | Deformationsgeschwindigkeitstensor | 1/s |
| $\widetilde{Z''^2}$ | Mischungsgradvarianz | — |
| A_N | Präexponentieller Faktor | — |
| C | Reaktionsfortschrittsvariable | — |
| C_g | Germano Konstante | — |
| C_s | Smagorinsky-Konstante | — |
| D | Diffusionskoeffizient | m ² /s |
| E_N | Aktivierungsenergie | J/mol |
| F | Interpolationsfunktion | — |
| F | Kraft | kgm/s ² |
| I | Impuls | kgm/s |
| J_j^α | Diffusiver Fluss der Spezies k in Koordinatenrichtung | kg/m ² s |
| L | Länge | m |
| L_i | Schallintensitätspegel | dB |
| L_{ij} | Leonard Spannungstensor | kg/m ² s |
| M_α | Molare Masse Spezies α | kg/mol |
| R_m | Universelle Gaskonstante R = 8,31445 | J/molK |
| R_{ij} | Zweipunktkorrelation | m ² /s ² |
| T | Periodendauer | s |
| T | Temperatur | K |
| U | Charakteristische Geschwindigkeit | m/s |
| V | Volumen | m ³ |
| Y_α | Speziesmassenbruch | — |
| Z | Mischungsgrad | — |
| Z_{st} | Stöchiometrischer Mischungsgrad | — |

Kleine lateinische Buchstaben

Einheit

| | | |
|--------------|------------------------------------|--------------------|
| Δh | Gitterweite | m |
| a | Schallgeschwindigkeit | m/s |
| c_α | Moldichte Spezies α | mol/m ³ |
| c_p | Spezifische isobare Wärmekapazität | J/kgK |
| f | Frequenz | 1/s |
| f_k | Nachbarwerte für Interpolation | — |
| h | Spezifische Enthalpie | J/kg |
| h_α^s | Sensible Enthalpie | J/kg |

| | | |
|------------------|--|---------------------------------|
| h_k | Abstand | m |
| $h_{f,\alpha}^0$ | Standardbildungsenthalpie | J/kg |
| k | Turbulente kinetische Energie | m^2/s^2 |
| k_f | Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizient | — |
| l_I | Integrales-Längenmaß | m |
| m | Masse | kg |
| m_* | Massenungleichgewicht | kg |
| $m_{e,\alpha}$ | Elementarmassenbrüche von Spezies α | — |
| p | Druck | Pa |
| p' | Druckfluktuation | Pa |
| p_{ref} | Referenzschalldruck | Pa |
| p_{rms} | Effektivwert Schalldruckfluktuation | Pa |
| q_j | Wärmefluss | $\text{J}/\text{m}^2\text{s}$ |
| r | Reaktionsgeschwindigkeit | $\text{mol}/\text{m}^3\text{s}$ |
| s_l | Laminare Flammengeschwindigkeit | m/s |
| s_t | Turbulente Flammengeschwindigkeit | m/s |
| t_I | Integrales-Zeitmaß | s |
| u' | Schallschnelle | m/s |
| w_k | Interpolationsgewicht | |

Große griechische Buchstaben

Einheit

| | | |
|----------------|--------------------------|---|
| Δ | Smagorinsky Filterweite | m |
| χ | Skalare Dissipationsrate | — |
| $\hat{\Delta}$ | Germano Test-Filterweite | m |
| Φ | Beliebiger Skalar | — |
| Φ | Äquivalenzverhältnis | — |

Kleine griechische Buchstaben

Einheit

| | | |
|-----------------------|--|--------------------------------|
| β – PDF | Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion Mischungsgrad | — |
| δ – PDF | Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion Fortschrittsvariable | — |
| δ_{ij} | Kronecker-Symbol | — |
| $\dot{\gamma}$ | Schergeschwindigkeiten | m/s |
| $\dot{\omega}_\alpha$ | Chemischer Quellterm | $\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$ |
| ϵ | Dissipation der turbulenten kinetischen Energie | m^2/s^3 |
| $\epsilon_{\Delta h}$ | Diskretisierungsfehler | — |
| η_k | Kolmogorov-Längenmaß | m |
| γ | Isentropenexponent | — |
| κ | Wellenzahl | $1/\text{m}$ |
| λ | Wellenlänge | m |
| λ_e | Interpolationsfaktor | — |
| λ_t | Wärmeleitfähigkeit | W/mK |
| λ_L | Verbrennungsluftverhältnis | — |
| μ | Dynamische Viskosität | kg/ms |
| ν | Molekulare kinematische Viskosität | m^2/s |
| ν' | Stöchiometrischer Koeffizient Edukte | — |
| ν'' | Stöchiometrischer Koeffizient Produkte | — |

| | | |
|--------------------|--|-------------------------|
| ν_t | Turbulente kinematische Viskosität | m^2/s |
| ν_{eff} | Effektive kinematische Viskosität | m^2/s |
| ω | Kreisfrequenz | $1/\text{s}$ |
| $\overline{\phi}$ | Beliebiger zeitlicher Mittelwert | — |
| ϕ | Instantane Strömungsgröße | — |
| ϕ' | Beliebige zeitliche Schwankungsgröße | — |
| ρ | Dichte | kg/m^3 |
| τ | Schubspannungen | N/m^2 |
| τ_η | Kolmogorov-Zeitmaß | s |
| τ_h | Residuum | — |
| τ_{ch} | Charakteristische chemische Zeit | s |
| τ_{ij} | Spannungstensor | kg/ms^2 |
| τ_{ij}^{sgs} | Feinspannungstensor Smagorinsky Modell | kg/ms^2 |
| τ_{ij}^{test} | Testgefilterter Feinspannungstensor | kg/ms^2 |
| τ_{mix} | Charakteristische Mischungszeit | s |

Operatoren und Symbole

| | | |
|--------------------|----------------------------------|---|
| $\bar{\cdot}$ | Räumliche Filterung | — |
| $\overline{\cdot}$ | Zeitlicher Mittelwert | — |
| $\hat{\cdot}$ | Räumliche Germano Testfilterung | — |
| $\tilde{\cdot}$ | Dichtegewichtete Favre-Filterung | — |

Abkürzungen

| | |
|-------------|--|
| <i>BEM</i> | Boundary Element Method |
| <i>CAA</i> | Computational Aero Acoustic |
| <i>CBC</i> | Convection Boundeness Criterion |
| <i>CDS</i> | Central Difference Scheme |
| <i>CFD</i> | Computational Fluid Dynamics |
| <i>DLR</i> | Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (German Aerospace Center) |
| <i>DNS</i> | Direct Numerical Simulation |
| <i>ESM</i> | Equivalent Source Method |
| <i>FDM</i> | Finite Differenzen Methode |
| <i>FGM</i> | Flamelet Generated Manifolds |
| <i>FPI</i> | Flame Prolongation of Intrinsic low-dimensional Manifolds |
| <i>FVM</i> | Finite Volumen Methode |
| <i>LES</i> | Large Eddy Simulation |
| <i>MPI</i> | Message Passing Interface |
| <i>PDF</i> | Probability Density Function |
| <i>RANS</i> | Reynolds Averaged Navier Stokes |
| <i>RHS</i> | Rechte Hand Seite (Gleichungen) |
| <i>RMS</i> | Root Mean Square |
| <i>SGS</i> | Subgrid scale or stress |
| <i>TNF</i> | International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Non-premixed Flames |
| <i>UDS</i> | Upwind Difference Scheme |
| <i>UHC</i> | Unverbrannte Kohlenwasserstoffe |

URANS Unsteady Reynolds Averaged Navier Stokes
 DRP Dispersion Relation Preserving
 LDDRK Low Dissipation and Dispersion Runge Kutta
 LEE Linearisierte Euler-Gleichungen

Dimensionslose Kennzahlen

| | | |
|-------------|-------------------------|---|
| Da | Damköhlerzahl | — |
| Kn | Knudsenzahl | — |
| Le_α | Lewiszahl | — |
| Ma | Machzahl | — |
| Pr | Prandtlzahl | — |
| Re | Reynoldszahl | — |
| Re_t | Turbulente Reynoldszahl | — |
| Sc | Schmidtzahl Zahl | — |
| Sc_t | Turbulente Schmidtzahl | — |

Kapitel 1

Einleitung

Verbrennungsprozesse spielen in der heutigen und zukünftigen Energie- und Transportwirtschaft eine tragende Rolle. Die Verbrennung stellt eine exotherme Redoxreaktion dar, bei der die im Brennstoff gespeicherte Energie in Form von Wärme freigesetzt wird. Die freigesetzte Wärme wird beispielsweise zur Energiegewinnung in thermischen Turbo- oder Kolbenmaschinen bzw. zur Generierung von Vortrieb in Flugtriebwerken genutzt. Obwohl bei der Verbrennung ein Trend zur Beimischung alternativ gewonnener Energieträger besteht, werden bei heutigen Verbrennungssystemen vorrangig fossile Energieträger umgesetzt. Hinsichtlich einer stetig zunehmende Weltbevölkerung und einem weltweit wachsenden Grad der Industrialisierung wird der Primärenergiebedarf kontinuierlich steigen. 80% des gesamten Energiebedarfes weltweit werden im Jahr 2035 durch fossile Energieträger bereitgestellt [8]. Der Energiebedarf der wachsenden Weltwirtschaft wird, abhängig von den gewählten Eckdaten, von 2015 bis 2035 um 34% steigen, wovon prognostiziert 60% durch fossile Energieträger gedeckt werden sollen [8]. Der Ausbau der regenerativen Energiesysteme schreitet weltweit stark voran. Die Europäische Union hat ihre Ziele für den Ausbau der erneuerbaren Energien auf 27% im Jahr 2030 vorgegeben [42]. Weltweit wird auf der Basis des Jahres 2015 bis zum Jahr 2035 eine Vervierfachung der Energieerzeugung durch erneuerbare Energien prognostiziert [8].

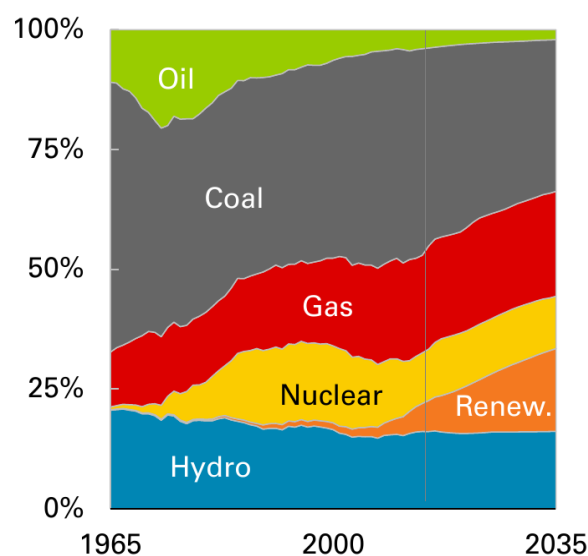


Abbildung 1.1: Prognose Weltenergieverbrauch nach Primärenergieträgern [8]

Die Speicherung dieser enormen Energiemenge ist bis heute ein Problem, das die Energiewirtschaft weltweit grundlegend verändern wird. Hinsichtlich der Speicherung von überschüssigem regenerativ gewonnenem Strom stellt die Hydrolyse von Wasser zu Wasserstoff eine vielversprechende Alternative bereit. Der so gewonnene Wasserstoff könnte entweder zur Energieerzeugung in Gasturbinen dienen oder zur Gewinnung von synthetischen Brennstoffen verwendet werden. Für die Verwendung von fossilen Energieträgern spielen in der Energieversorgung ökonomische Gesichtspunkte die entscheidende Rolle. In der Transportwirtschaft, speziell in der Luftfahrt, werden diese ökonomischen Gesichtspunkte durch die sehr hohen Energiedichten von fossilen bzw. flüssigen Energieträgern ergänzt. Aus den genannten Gründen wird die Verbrennung von fossilen oder regenerativ gewonnenen Energieträgern auch zukünftig weltweit eine Schlüsselrolle in der Energie- und Transportwirtschaft spielen. Besonders im weltweiten Luftverkehr ist die Verbrennung von Flüssigbrennstoffen auf Kohlenwasserstoffbasis zur Zeit alternativlos. Ein Hauptproblem bei der Verbrennung von fossilen Energieträgern liegt in der Erzeugung des klimaschädlichen Verbrennungsproduktes CO_2 . Die Erzeugung von CO_2 bei der Verbrennung ist direkt mit dem Umsatz von Energieträgern auf Kohlenwasserstoffbasis gekoppelt. Hinsichtlich der prognostizierten Zunahme des weltweiten Primärenergiebedarfes und des vorhergesagten Anteils an verbrennungsgestützten Umwandlungsprozessen, ist es zwingend erforderlich die Effizienz von Verbrennungssystemen deutlich zu steigern.

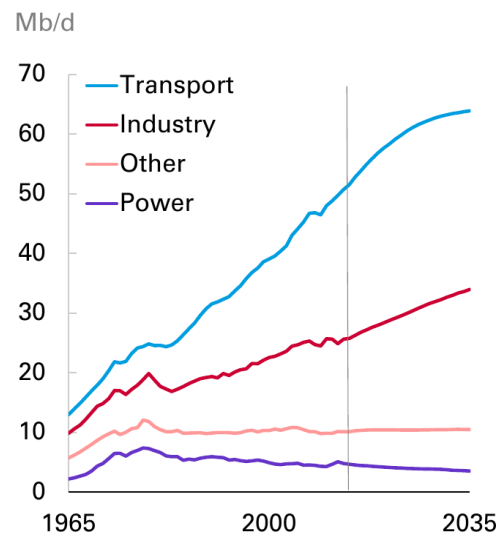


Abbildung 1.2: Prognose des Bedarfs an Flüssigbrennstoffen [8]

Für ein besseres Verständnis der allgemeinen Verbrennungsprozesse und der Bildung von Verbrenungsschadstoffen sowie zur effizienten Auslegung von komplexen Verbrennungssystemen hat sich die computergestützte Simulation heutzutage etabliert.

1.1 Motivation

Um in Betracht der anthropogenen Klimaveränderung und den Konflikt Wirtschaftswachstum und Schutz von Arbeitsplätzen in Einklang zu bringen, ist es zwingend not-

wendig die Effizienz von modernen Verbrennungssystemen zu erhöhen und den Ausstoß von klimaschädlichem CO_2 und giftigen Stickoxiden NO_x zu minimieren. Hierzu ist ein besseres Verständniss der Verbrennung, wie im letzten Abschnitt eingeleitet, ein entscheidender Faktor, um moderne verbrauchsoptimierte und schadstoffarme Verbrennungssysteme zu konzipieren. Neben dem Wunsch moderne Verbrennungssysteme hinsichtlich ihres Brennstoffverbrauchs und der Schadstoffemissionen zu optimieren, existiert als weiterer Gesichtspunkt eine Minimierung des Verbrennungslärms bzw. der schallinduzierten Verbrennungsinstabilitäten. Verbrennungslärm ist gekennzeichnet durch Druckschwingungen in der Brennkammer die infolge der Verbrennung entstehen. Diese Druckschwingungen können außerhalb der Brennkammer als Verbrennungslärm wahrgenommen werden und sind meist unerwünscht aber schwer vollständig zu vermeiden. Druckschwingungen in Brennkammern werden in einer Vielzahl von Feuerungsanlagen beobachtet, von üblichen Haushaltsbrennern über Brennkammern von Fluggasturbinen sowie in stationären Gasturbinen. Bei modernen Mantelstromflugtriebwerken steht der Verbrennungslärm der Brennkammer an dritter Stelle der Geräuschverursacher direkt nach der ersten Schaufelreihe (Fan) und dem Strahlärm hinter dem Flugtriebwerk [27]. Mit der Einführung verschärfter Schadstoffgrenzwerte bei Verbrennungsprozessen wurde in der Vergangenheit in vielen industriellen Bereichen ein Wechsel der Verbrennungskonzepte hin zu einer mager vorgemischten Verbrennung vollzogen. Die mager vorgemischte Verbrennung zeichnet sich durch eine im Vergleich zur stöchiometrischen Verbrennung reduzierte Verbrennungstemperatur aus, mit der eine Minimierung der Stickoxidproduktion (NO_x) verbunden ist. Leider neigen diese verbrauchs- und schadstoffreduzierten mageren Verbrennungskonzepte zu thermoakustischen Instabilitäten infolge von akustischen Rückkoppelung der verbrennungsinduzierten Druckschwingungen auf die Flamme. Besonders prägnant traten diese Instabilitäten bei stationären Gasturbinen mit dem Wechsel zur schadstoffarmen Magerverbrennung auf. Hierbei wurden in Abhängigkeit der Betriebsbedingungen der Gasturbine Flammeninstabilitäten festgestellt, die eine Verstärkung der Druckschwingungsamplitude in der Brennkammer hervorgerufen haben. Diese Druckschwingungsamplituden können unter bestimmten Voraussetzungen bis zur Zerstörung der Brennkammer ansteigen. Diese Voraussetzungen sind nach dem Rayleigh-Kriterium gegeben, wenn eine erhöhte Wärme-freisetzungsrates infolge der Verbrennung mit einer Erhöhung des Druckes wechselwirkt und so nach dem rechtsläufigen thermodynamischen Kreisprozess Wärme in mechanische Arbeit umgewandelt wird [56]. Diese thermoakustischen Instabilitäten werden durch eine Vielzahl von Faktoren beeinflusst und sind Gegenstand intensiver Forschung.

Bei der Auslegung neuartiger Verbrennungssysteme sind experimentelle Untersuchungen unerlässlich. Diese Untersuchungen sind sehr kosten- und zeitintensiv sowie oft schwer durchführbar, weil die Komplexität und teils extreme Randbedingungen des Verbrennungssystems die Zugänglichkeit mit messtechnischen Instrumenten erschwert. Mit Hilfe der computergestützten Simulation moderner Verbrennungssysteme können viele der genannten Probleme und vor allem finanzielle Risiken bei der Auslegung vorab minimiert und eine kosten- und zeitoptimierte Entwicklung vorangetrieben werden.

In dieser Arbeit steht die Weiterentwicklung von Simulationswerkzeugen zur Berechnung von Verbrennungslärm und den rückwirkenden Einflüssen von verbrennungsinduzierten Druckschwingungen auf die Verbrennung im Fokus. Die numerische Simulation von Verbrennungssystemen mit ihren akustischen Eigenschaften verbindet die naturwissenschaft-

lichen Teilbereiche der Strömungsmechanik, der Verbrennungstechnik und der numerischen Mathematik sowie der Akustik miteinander und stellt im Ganzen eine erhebliche Herausforderung dar. Zuerst muss eine genaue Berechnung der akustischen Quellen durch die numerische Verbrennungsrechnung gewährleistet sein, welche neben den strömungsmechanischen Eigenschaften zusätzlich eine akkurate Beschreibung der chemischen Prozesse beinhalten muss. Für eine exakte Berechnung der akustischen Eigenschaften sind aus Sicht der Numerik spezielle dispersions- und dissipationsarme Diskretisierungsverfahren für eine exakte Schallausbreitung sowie spezielle akustische Randbedingungen zwingend erforderlich.

1.2 Stand der Forschung

In den beiden vorangegangenen Abschnitten wurde bereits erwähnt, dass die computergestützte Simulation einen entscheidenden Beitrag bei der Auslegung von modernen Verbrennungssystemen leistet. Bei der Optimierung und Auslegung der Prozesse werden computergestützte Berechnungsverfahren zur Lösung von strömungsmechanischen Problemen eingesetzt (engl. *Computational Fluid Dynamics*, kurz CFD). Mit diesen Verfahren können für die Auslegung und Optimierung von Verbrennungssystemen im Vorfeld detaillierte Informationen der (reagierenden) turbulenten Strömung in der Brennkammer bzw. in der Maschine berechnet werden.

Derzeit findet man in der Industrie vorrangig Simulationssverfahren, die eine stationäre Strömungssimulation durchführen und als Resultat zeitlich gemittelte Größen wie z.B. die mittlere Temperaturverteilung am Brennkammeraustritt zur Verfügung stellen können. Die Methoden, die mit zeitlich gemittelten Größen arbeiten, sind als RANS-Methoden (engl. *Reynolds-Averaged-Navier-Stokes* kurz RANS) bekannt und weltweit im industriellen Kontext etabliert. Ein Hauptgrund für die Verwendung von RANS-Methoden ist die Rechenzeiterparnis infolge der Modellierung der turbulenten Transportprozesse. Hierbei wird der Einfluss der Turbulenz im gemittelten Gleichungssystem über modellierte Terme berücksichtigt. In Hinsicht auf die steigenden Rechenkapazitäten befasst sich die aktuelle Forschung mit der Weiterentwicklung von detaillierten, instationären Simulationsmethoden, um die Ergebnissgenauigkeit von turbulenten Verbrennungssimulationen weiter zu erhöhen. Hierbei unterscheidet man zwischen der Direkten Numerischen Simulation (DNS), bei der alle turbulenten Wirbelstrukturen vom numerischen Gitter aufgelöst werden und der Grobstruktursimulation (engl. *Large-Eddy-Simulation* kurz LES), bei der ca. 80% der turbulenten Wirbelstrukturen aufgelöst werden und der restliche Teil über eine Modellierung abgebildet wird. Weitere Informationen zu den unterschiedlichen strömungsmechanischen Simulationsmethoden und deren Vor- und Nachteilen werden im Verlauf dieser Arbeit näher erläutert.

Für die Beschreibung der akustischen Eigenschaften eines Verbrennungssystems muss ein zeitaufgelöstes Verfahren verwendet werden. Hierzu bietet sich auf der einen Seite eine instationäre kompressible Strömungssimulation an, die die Information über die akustischen Schallwellen und deren Ausbreitung in den zugrundeliegenden Gleichungen beinhaltet. Auf der anderen Seite stehen die hybriden Verfahren, die aufgrund der Disparität der akustischen und hydrodynamischen Energien, der Längen- und Zeitskalen eine Trennung

zwischen den kleinskaligen reagierenden Strömungsstrukturen und den großskaligen akustischen Wellen vornehmen. Diese Skalenseparation wird als Multiskalenproblem bezeichnet. Bei den hybriden Verfahren wird eine inkompressible Strömungssimulation mit einer Akustiksimulation aus dem Bereich der *Computational Aeroacoustic* (CAA) gekoppelt. Hierbei werden geeignete Quellterme aus der Strömungssimulation an die CAA-Simulation übergeben, woraus physikalische Schallquellen generiert und deren Wellenausbreitung simuliert werden kann.

Die Grobstruktursimulation (LES) stellt im Kontext der Verbrennungslärmsimulation eine geeignete mathematische Basis für die akustische Quelltermformulierung bereit [14, 63] und wird in Kombination mit einer Akustiksimulation als hybrides LES/CAA-Verfahren bezeichnet.

Ziel dieser Arbeit ist die Weiterentwicklung hybrider LES/CAA-Verfahren, um die akustischen Eigenschaften und deren Wechselwirkung mit der reagierenden Strömung, sowie thermoakustische Instabilitäten von Verbrennungssystemen numerisch abbilden zu können.

Erste theoretische Untersuchungen zur Beschreibung von strömungsinduziertem Schall wurden von Lighthill 1952 postuliert [75, 76]. Lighthill postulierte abgeleitet aus den klassischen Navier-Stokes Gleichungen eine Wellengleichung, die noch heute in ihren Grundzügen als akustische Analogie im Bereich der Schallberechnung Anwendung findet. Motiviert durch die stark zunehmende Verwendung von Strahltriebwerken in der zivilen Luftfahrt anfang der 50er Jahre stieg das Interesse an der Beschreibung von strömungsinduziertem Lärm und der Minimierung der Schallemission. Eine ausführliche Zusammenfassung der Arbeiten im Bereich der strömungsinduzierten Schallberechnung ist in [117] zu finden. Neben den theoretischen Arbeiten im Bereich des strömungsinduzierten Lärms wurden von Crocco und Cheng [23] erste theoretische Arbeiten zu thermoakustischen Instabilitäten bei Raketentriebwerken unternommen. Diese Arbeiten markieren den Grundstein in der Beschreibung von thermoakustischen Instabilitäten.

Erste theoretische Arbeiten zu direktem turbulenten Verbrennungslärm wurden von Bragg 1963 [9] und von Smith [112] experimentell vorgenommen. Beide untersuchten die akustische Schallabstrahlung von turbulenten Freistrahlfammen im Fernfeld. Hierin wurde festgestellt, dass der grundlegende Quellenmechanismus von direktem turbulentem Verbrennungslärm einen monopolartigen Charakter aufweist. Hierbei kann die turbulente Flamme akustisch aus zahlreichen statistisch unabhängigen über die Flamme verteilten Monopolquellen unterschiedlicher Stärke und Phase beschrieben werden [113] [9]. 1966 wurde von Thomas und Williams [120] ein klassisches Experiment zum Nachweis von Verbrennungslärm durchgeführt. Hierbei wurde eine Seifenblase gefüllt mit einem vorge-mischten Brennstoff-Luft Gemisch, an einer Zündkerze hängend, zentral in der Seifenblase gezündet. Aus der transienten thermischen Expansion des Gemisches und der rapiden Volumenänderung der Seifenblase resultiert eine akustische Welle, die ebenfalls im Fernfeld bei kleinen Seifenblasendurchmessern im Vergleich zur ausgestrahlten Wellenlänge als punktförmige Monopolquelle betrachtet werden kann. Kotake und Hatta [67] zeigten auf Basis einer inhomogenen Wellengleichung für reagierende Strömungen, dass die instationäre Dichteänderung bei turbulenten Diffusionsflammen eine der dominanten Schallquellen darstellt. Strahle [113] entwickelte basierend auf den Lighthill-Analogien eine Wellengleichung für reagierende Mehrkomponentenströmungen und zeigte theoretisch

wie auch Singh und Frankel [108, 109] experimentell, dass turbulente Verbrennungslärm-schallquellen im niedrigen Machzahl-Bereich bis zu zwei Größenordnungen stärker sind als strömungsinduzierte Schallquellen. Strahle [114] zeigte im weiteren eine direkte Korrelation zwischen dem akustischen Druck und dem Volumenintegral der zeitlichen Ableitung der globalen Reaktionsrate. Im Zuge dieser Erkenntnisse wurde eine detailliertere Beschreibung der physikalischen und chemischen Vorgänge in turbulenten Verbrennungssystemen durchgeführt [66, 121]. Hierbei wurde für den direkten verbrennungsinduzierten Schall die Fluktuation der instationären Wärmefreisetzungsrates in turbulenten Freistrahlfammen als dominante akustische Schallquelle identifiziert. In den frühen Arbeiten im Bereich der Schallberechnung wurde ein homogenes ruhendes Grundströmungsfeld mit konstanter Schallgeschwindigkeit zugrunde gelegt, weshalb die Berechnung nur für die Schallberechnung im Fernfeld geeignet ist. Aufgrund der begrenzten Rechenkapazitäten wurden vereinfachte integrale Methoden auf Basis der Lighthill Analogien entwickelt, um die Schallemission im Fernfeld zu berechnen. Die bekanntesten Verfahren aus der Gruppe der integralen Verfahren sind neben der Lighthill Analogie die Kirchhoff-Integrale beziehungsweise die aus den Kirchhoff-Integralen abgeleitete Randelemente-Methode (engl. *Boundary-Element-Method* kurz BEM) und die Ersatzstrahler-Methode (engl. *Equivalent Source Method* kurz ESM) sowie die Ffowcs-Williams-Hankings Gleichungen (FW-H). In Bezug zu den hybriden Verfahren und der gekoppelten Beschreibung von strömungsinduziertem Schall im Fernfeld hat beispielsweise Lyrantzis [78] die von Ffowcs-Williams und Hankings (FW-H) entwickelten Gleichungen mit gängigen CFD Verfahren erfolgreich zur Anwendung gebracht. Auf Basis einer stationären reagierenden RANS Simulation einer turbulenten nicht vorgemischten Flamme stellten Klein & Kok [62] ein statistisches Quelltermmodell zur Berechnung der Schallabstrahlung vor. Hierbei wurde die instationäre Wärmefreisetzungsrates mittels statistisch modellierter Quellterme auf Basis der statistischen Turbulenzgrößen aus der RANS Simulation in die integrale Akustikberechnung eingebracht. Verbrennungsinduzierter Schall im Fernfeld wurde auf Grundlage einer reaktiven inkompressiblen LES einer Freistrahlfamme mit Hilfe einer Randelemente-Methode (BEM) von Brick [11] und mittels Ersatzstrahler-Methode (ESM) von Piscoya [90] berechnet. Zur Berechnung der Schallemissionen einer vorgemischten Drallflamme präsentierte [49] eine spektrale Verteilungsfunktion der fluktuierenden Wärmefreisetzungsrates, um den akustischen Quellterm zu modellieren. Erste Simulationen zur Untersuchung von Verbrennungslärm in realen Brennkammern [81, 51, 99] wurden um die Jahrtausendwende mit Hilfe von sehr aufwendigen und kostenintensiven kompressiblen LES Simulationen unternommen. Hierbei konnten Druckschwankungsspitzen und Instabilitäten nachgewiesen werden, jedoch können ohne zusätzliche Hilfsmittel keine Angaben über Ursprung und Wachstum der Instabilitäten identifiziert werden.

Duwig et al. [29] zeigten 2005 eine hybride LES/CAA Berechnung einer verdrallten eingeschlossenen Flamme mit Hilfe einer halb kompressiblen LES für das reagierende Strömungsfeld, gekoppelt mit einer Wellengleichung für inhomogene Grundströmungszustände zur Berechnung der akustischen Eigenschaften, die Entstehung und Ausbreitung von thermoakustischen Wellen in einer Brennkammer. Hierbei konnte eine starke Abhängigkeit der Druckfluktuationen zu Scherschichtinstabilitäten infolge von Wirbelzerfallsprozessen nachgewiesen werden. 2007 verwendete Flemming et al. [36] die Dichtefluktuation aus einer inkompressiblen reagierenden LES gekoppelt mit Lighthill's akustischer Analogie, um den

turbulenten Verbrenungslärm einer offenen Wasserstoffstrahlflamme zu berechnen. Ein ähnlicher Ansatz wurde 2007 von Ihme et al. [52] auf Basis einer inhomogenen Wellengleichung und auf Basis der Gleichung von Phillips [89] vorgestellt. Bei den hybriden Ansätzen zur Berechnung von turbulentem Verbrenungslärm lässt sich die Ausbreitung des Schalls entweder mittels der vorgestellten integralen Verfahren oder durch die aufwendigere numerische Lösung von Störgleichungen im Zeit- oder Frequenzbereich berechnen. In den bis jetzt vorgestellten Ansätzen wurden ausnahmslos integrale Verfahren verwendet, um die Ausbreitung der akustischen Wellen von turbulenten Flammen zu beschreiben. Aufgrund der stark gestiegenen numerischen Rechenkapazitäten in den letzten Jahren werden mittlerweile verstärkt Ansätze auf Basis von Störgleichungen angewendet. Die bekanntesten Vertreter sind die linearisierten Euler-Gleichungen (engl. Linearized Euler Equation LEE) und die Acoustic Perturbation Equation (APE). Im Vergleich zu den integralen Methoden sind die Störgleichungen sowohl in der Lage die Schallentstehung und -ausbreitung von akustischen Wellen in komplexen geschlossenen Geometrien zu berechnen als auch, falls ein konvektiver Term in der Herleitung enthalten ist, die Konvektion von Schallwellen zu berücksichtigen. Bui et al. [15] publizierten hierzu einen ersten hybriden Ansatz, der eine inkompressible reagierende LES mit den APE-Gleichungen für reagierende Strömungen APE-RF (engl. *Acoustic Perturbation Equation for Reacting Flows*) koppelt, um eine turbulente Jetflamme mit Refraktionseffekten zu berechnen. In der Arbeit wurde außerdem eine ausführliche theoretische und numerische Untersuchung der akustischen Quellterme vorgenommen und die partielle Zeitableitung der Dichte, wie auch schon in vorangegangenen Arbeiten, als dominante verbrennungsinduzierte akustische Quelle identifiziert. Einen auf einer stochastischen Quellenrekonstruktion im Zeitbereich basierenden hybriden Ansatz veröffentlichte Mühlbauer im Jahr 2009 [83]. Hierbei wurde auf Basis der statistischen Turbulenzgrößen einer RANS Simulation eine stochastische Rekonstruktion der Verbrenungsquellterme vorgenommen und die Schallausbreitung mit Hilfe der linearisierten Euler-Gleichungen (LEE) berechnet. Klewer et al. [64, 63] zeigten einen hybriden LES/CAA Ansatz zur simultanen Beschreibung der reagierenden Strömung und der Akustik, bei dem die akustischen verbrennungsinduzierten Quellterme aus einer inkompressiblen reagierenden LES gewonnen und auf das CAA Gitter interpoliert wurden. Die Schallausbreitung wurde mittels der linearisierten Euler Gleichungen (emgl. *Linearized Euler Equations* kurz LEE) berechnet.

1.3 Ziel der Arbeit

Das Ziel dieser Arbeit ist ein industriell anwendbares numerisches Gesamtmodell für die Berechnung von Verbrenungslärm zu finden, das zusätzlich eine Vorhersage von thermoakustischen Instabilitäten sowie die akustischen Rückwirkungen auf eine reagierende Umgebung in eingeschlossenen, technischen Verbrennungssystemen abbilden kann. Dazu wird in dieser Arbeit ein hybrider Berechnungsansatz verfolgt, der auf Basis einer effizienten, inkompressiblen reagierenden Strömungssimulation die akustischen Quellterme für eine simultane Akustiksimulation berechnet. Im Umkehrschluss findet zwischen dem numerisch berechneten akustischen Schalldruckfeld und dem Strömungsfeld eine Überlagerung statt mit der die Entstehung von thermoakustischen Instabilitäten vorhergesagt werden kann. Im Rahmen dieser Arbeit wird für die Berechnung der dreidimensionalen reagieren-

den Strömung eine Grobstruktursimulation verwendet. In diesem Zusammenhang wird von einer hybriden 2-Wege LES/CAA Methode gesprochen, welche eine Rückkopplung von akustischen Feldgrößen in der Strömungssimulation berücksichtigen kann.

Die Vorhersagefähigkeit der hybriden LES/CAA-Methode in Bezug auf den Verbrennungslärm und die Entstehung von thermoakustischen Instabilitäten soll durch die Berechnung von generischen Konfigurationen und dem Vergleich mit experimentell gewonnenen Daten analysiert werden. Die Basis für die hybride LES/CAA Methode besteht aus dem industriell in zahlreichen Anwendungen verwendeten inkompressiblen Strömungslöser PRECISE-UNS der Firma Rolls-Royce und dem akademischen Aeroakustikprogramm PIANO-5.5 des Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt. Hiermit wird eine dreidimensionale Simulation der reagierenden Strömung inklusiver ihrer akustischen Eigenschaften ermöglicht.

1.4 Struktur der Arbeit

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der numerischen Simulation von Verbrennungssystemen. Zum besseren Verständnis der hybriden LES/CAA Methode werden in den folgenden Kapiteln Grundlegende Informationen zu den verwendeten Methoden vorgestellt.

Hierzu wird in Kapitel 2 eine kurze Einführung in den Sachverhalt der turbulenten Strömungen und der prinzipiellen Beschreibungsweise solcher Strömungsformen gegeben. Am Ende von Kapitel 2 wird die numerische Abbildung von turbulenten Strömungen im allgemeinen angerissen und die in dieser Arbeit verwendete Grobstruktursimulation detaillierter vorgestellt.

In dieser Arbeit wird die Simulation von technischen Verbrennungssystemen behandelt. Hierzu werden in Kapitel 3 die Grundlagen der Verbrennung vorgestellt und die Modelle zur numerischen Beschreibung von Verbrennungsprozessen vorgestellt sowie auf das in dieser Arbeit verwendete Flamelet Generated Manifolds-Modell im Kontext der tabellierten Chemie näher eingegangen.

In Kapitel 4 wird die Akustik vorgestellt. Neben der allgemeinen Beschreibung akustischer Felder und der verwendeten akustischen Feldgrößen werden die numerischen Methoden der Akustiksimulation beschrieben. Zusätzlich zu der allgemeinen akustischen Wellenausbreitung, werden die Entstehungs- und Beschreibungsmechanismen von thermoakustisch induzierten Schallereignissen behandelt und die akustischen Quelltermgenerierung im Kontext der Grobstruktursimulation erläutert.

Kapitel 5 ist den allgemeinen numerischen Methoden zur Beschreibung von strömungsmechanischen und akustischen Feldern gewidmet. Hier werden die numerischen Methoden des verwendeten Strömungs- und Akustiklösers detailliert beschrieben.

In Kapitel 6 wird die Überprüfung der in dieser Arbeit verwendeten Schnittstelle zwischen den Programmen der Strömungs- und Akustiksimulation anhand von generischen Testfällen gezeigt und die Fähigkeit der Eigenfrequenzbestimmung in geschlossenen

Geometrien demonstriert bevor in Kapitel 7 Berechnungen von Verbrennungssystemen anhand von experimentellen Daten verglichen werden.

In Kapitel 7 werden mit der entwickelten hybriden LES/CAA Methode neben einer Berechnung einer Wasserstofffreistrahlflamme zwei Berechnungen einer generischen Brennkammer gezeigt und mit experimentellen Daten verglichen. Für die gezeigte generische Brennkammer werden ein thermoakustisch stabiler und instabiler Betriebspunkt simuliert und die Fähigkeit der Vorhersage von thermoakustischen Instabilitäten mit der entwickelten Methode dargestellt.

Abschließend wird in Kapitel 8 eine Zusammenfassung der vorliegenden Arbeit und ein Ausblick für zukünftige Arbeiten gegeben.

Kapitel 2

Turbulente Strömungen

In diesem Kapitel werden die allgemeinen Erhaltungsgleichungen zur Beschreibung von Strömungen im Kontext der Kontinuumsmechanik eingeführt. Im Rahmen dieser Arbeit liegt der Fokus auf den reagierenden Fluidströmungen in technischen Apparaturen, welche in hohem Maße durch eine turbulente Strömungsbewegung charakterisiert sind. Aus diesem Grund wird der Beschreibung sowie der Modellierung turbulenter Strömungsformen ein besonderes Interesse zuteil. Neben der theoretischen Charakterisierung der Turbulenz wird im Abschluss dieses Kapitels die numerische Berechnung turbulenter Strömungen näher erläutert. Hier liegt das besondere Augenmerk auf der in dieser Arbeit verwendeten Grobstruktursimulation. Im den folgenden Kapiteln wird von der Einsteinschen Summenkonvention Gebrauch gemacht.

2.1 Strömungsmechanische Grundgleichungen

Das Gebiet der Mechanik lässt sich grob in die Bereiche der Festkörper- und Fluidmechanik unterteilen. Das Gebiet der Fluidmechanik beschäftigt sich mit den Eigenschaften und dem Verhalten von Fluiden, zu denen Flüssigkeiten und Gase zählen. Der Unterschied zwischen Fluiden und Festkörpern, wie sie in der Festkörpermechanik behandelt werden, liegt in ihrer molekularen Struktur, die bei Fluiden im Gegensatz zu Festkörpern bei Einwirkung von äußeren Kräften keinen bzw. einen sehr geringen Widerstand gegen eine Deformation aufweist. Obwohl zwischen den zahlreichen Fluiden große makroskopische Unterschiede bestehen, unterliegen sie den gleichen physikalischen Bewegungsgesetzen zur Beschreibung ihres Strömungsverhaltens. Für die mathematische Beschreibung von Fluidbewegungen existieren zwei Möglichkeiten, zum einen die kinetische Gastheorie und zum anderen die Kontinuumstheorie. In den meisten praktischen Anwendungen ist es üblich, das Fluid als Kontinuum zu beschreiben. Bei der Kontinuumsbetrachtung geht man von einer unveränderlichen und kontinuierlich zusammenhängenden Substanz aus. In diesem Kontinuum wird das Fluidteilchen als ein materieller Punkt definiert, dessen Eigenschaften als Funktionen von Ort und Zeit behandelt werden. Ein wichtiges Kriterium für die Anwendbarkeit der Kontinuumsbetrachtung gibt die Knudsenzahl Kn an. Die Knudsenzahl Kn gibt das Verhältnis der freien Weglängen λ zur charakteristischen Abmessung L des Strömungsproblems an [1].

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (2.1)$$

Für die Beschreibung als Kontinuum muss die Knudsenzahl Kn stets kleiner als 0,01 sein. In der Mechanik ist es üblich die Bewegung von Körpern und Fluiden, in der Definition als Kontinuum, durch Erhaltungsgesetze zu beschreiben. Hierbei wird die Erhaltung der extensiven Eigenschaften Masse, Impuls und Energie einer Materie betrachtet. In der Festkörpermechanik werden die extensiven Größen betrachtet, weil die Massenschwerpunkte leicht zu definieren und zu verfolgen sind. In der Strömungsmechanik ist es sehr schwer, die Massenschwerpunkte der Fluidteilchen zu identifizieren und zu verfolgen. Hier ist es einfacher, ein definiertes Kontrollvolumen zu betrachten und Bilanzen über die ein- und ausströmenden intensiven Größen zu machen. Der Vorteil der intensiven Größen, wie zum Beispiel der Dichte ρ , der Geschwindigkeit \vec{v} und der spezifischen Enthalpie h , liegt in ihrer Massenunabhängigkeit. Aus den intensiven Größen ϕ lassen sich die zugehörigen extensiven Größen Φ leicht über eine Volumenintegration über die definierten Kontrollvolumen gewinnen. Die Ursache für die Bewegung von Fluiden kann auf das Einwirken von Druck- und Dichtegradienten, Scher- und Oberflächenspannungen sowie Rotations- und Gravitationseinflüssen zurückgeführt werden, wobei meist die gradienten- und spannungsinduzierte Bewegung in technischen Apparaten dominiert. Alle diese Einflüsse bewirken eine Änderung der kinetischen und potentiellen Energie des Fluids. Trotz erheblicher Unterschiede in den molekularen Eigenschaften verhalten sich Fluide unter der Einwirkung von Kräften ähnlich. Zur Beschreibung der Fluidströmung müssen die molekularen Eigenschaften des Fluids durch die Einführung von mathematisch idealisierten Materialgleichungen wiedergegeben werden, die das unterschiedliche makroskopische Materialverhalten berücksichtigen. Die wichtigsten makroskopischen Materialeigenschaften von Fluiden sind die stark temperaturabhängige Dichte ρ und Viskosität μ . Durch die Viskosität werden allgemein die Transporteigenschaften des Fluids charakterisiert, und sie ist für den Impulstransport senkrecht zur Hauptströmungsrichtung verantwortlich. Für die meisten Fluide besteht ein linearer Zusammenhang zwischen den Schubspannungen τ und den Schergeschwindigkeiten $\dot{\gamma}$, weshalb sie als newtonsche Fluide bezeichnet werden können. Eine zweite Art der Fluide stellt einen meist nichtlinearen Zusammenhang zwischen τ und $\dot{\gamma}$ her und wird deswegen als nicht newtonsche Fluide bezeichnet [1]. Aus dem Verhältnis der dynamische Viskosität μ zur Dichte ρ erhält man die kinematische Viskosität ν :

$$\text{kinematische Viskosität } \nu = \frac{\mu}{\rho} \quad \text{dynamische Viskosität } \mu = \nu \rho$$

die bei der mathematischen Beschreibung von reibungsbehafteten Strömungen wichtig ist. Mit der Annahme der Kontinuumsbewegung von Fluiden leitete Leonard Euler einen Satz von Erhaltungsgleichungen her, die heute als Euler-Gleichungen bekannt sind. Euler traf dabei die vereinfachende Annahme der Reibungsfreiheit in der Strömung. Auf die Euler-Gleichungen wird in Kapitel 4 näher eingegangen. Berücksichtigt man die Materialeigenschaften der Fluide und somit die innere Reibung, gelangt man zu einem Satz von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen, die als Navier-Stokes-Gleichungen bekannt sind. Zur Beschreibung laminarer und turbulenter Strömungen sind die Navier-Stokes-Gleichungen gleichermaßen geeignet. Auf eine detaillierte Herleitung der Navier-Stokes-Gleichungen wird in dieser Arbeit nicht eingegangen und auf weiterführende Literatur verwiesen [1].

2.1.1 Massenerhaltungsgleichung

Die Massenerhaltungsgleichung oder häufig auch Kontinuitätsgleichung beschreibt, dass die Masse in einem definierten Kontrollvolumen ohne Massenquellen bzw. Massensenken konstant bleiben muss. Sie stellt eine Bilanzgleichung dar, welche die zeitliche Änderung der Masse ins Gleichgewicht mit den eintretenden bzw. austretenden Massenflüssen über eine gedachte Kontrollvolumenfläche bilanziert

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0. \quad (2.2)$$

Für inkompressible bzw. volumenbeständige oder nicht reaktive Strömungen kann die Dichte als konstant angenommen werden und die Massenerhaltungsgleichung vereinfacht sich zu

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0. \quad (2.3)$$

Die Annahme der Inkompressibilität ist gegeben, wenn die absolute Änderung des Drucks innerhalb des beobachteten Gebietes klein ist, die Strömungsgeschwindigkeiten wesentlich kleiner sind als die Schallgeschwindigkeit und keine akustischen Effekte beinhaltet sein sollen. In Hinblick auf den Vergleich zwischen Strömungs- und Schallgeschwindigkeit kann eine dimensionslose Kennzahl definiert werden, die nach ihrem Erfinder Ernst Mach, als Machzahl Ma bekannt ist:

$$Ma = \frac{u}{a} \quad (2.4)$$

Unterhalb einer Machzahl Ma von 0.3 können Strömungen ohne großen Fehler als inkompressible Strömungen behandelt werden. Aus dieser Annahme ergeben sich zahlreiche Vereinfachungen in den beschreibenden Gleichungen, die im Verlauf näher erläutert werden. Mit der Definition (2.3) der Kontinuitätsgleichung lassen sich alle anderen Erhaltungsgleichungen umformen und vereinfachen.

2.1.2 Impulserhaltungsgleichung

Die Impulserhaltungsgleichung ist aus dem zweiten Newtonschen Gesetz abgeleitet und beschreibt die zeitliche Änderung des Impulses eines Körpers durch die auf den Körper einwirkenden Kräfte.

$$\frac{DI}{Dt} = \sum F \quad (2.5)$$

Im Fall der Strömungsmechanik stellt der Körper ein definiertes Kontrollvolumen mit Flüssigkeit bzw. Gas dar und wird als gedachter materieller Punkt behandelt. Die Kräfte, die an dem materiellen Punkt angreifen, lassen sich in Massen- bzw. Volumenkräfte und Oberflächen- bzw. Kontaktkräfte einteilen. Volumenkräfte wirken je Masseneinheit, wohingegen die Oberflächenkräfte je Flächeneinheit wirken. Die Impulserhaltungsgleichung setzt die zeitliche Änderung des Impulses ins Gleichgewicht zu dem Transport von Masse

mit der Geschwindigkeit u über die Kontrollvolumenoberflächen, sowie zu den am materiellen Punkt angreifenden Volumen- bzw. Oberflächenkräften.

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho k_i \quad (2.6)$$

k_i repräsentiert in der Gleichung (2.6) die Massen- bzw. Volumenkräfte die auf das Fluid einwirken. Die bekannteste Massenkraft ist die Gravitationskraft, die auf jedes Fluidteilchen gleichermaßen einwirkt. Der Druckgradient und der Cauchy-Spannungstensor stellen Oberflächenkräfte dar und zeigen ihre Wirkung auf den Kontrollvolumenoberflächen. Der Cauchy-Spannungstensor τ_{ij} beinhaltet die fluidspezifischen Materialeigenschaften:

$$\tau_{ij} = -\rho\nu \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \rho\nu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (2.7)$$

Er ist neben dem Ort und der Zeit auch von der Orientierung eines Flächenelementes abhängig. Das Kronecker-Symbol δ_{ij} nimmt in die Hauptkoordinatenrichtungen, den Wert $i = j = 1$ an und ist ansonsten 0. Aufgrund dieser Abhängigkeiten ergibt sich ein symmetrischer Tensor zweiter Stufe, dessen Diagonalelemente die Normalspannungen wiedergeben und die Nebendiagonalelemente Schubspannungen repräsentieren. Um das resultierende Gleichungssystem zu schließen, müssen für den Cauchyschen Spannungstensor Annahmen getroffen werden, welche die Eigenschaften des Fluids wiedergeben. Hier wird häufig die für reale Fluide gültige Annahme der newtonschen Fluideigenschaften angewendet [1]. In Newtonschen Fluiden sind die viskosen Spannungen proportional zu der lokalen Scherungsrate in der Strömung und es besteht somit ein linearer Zusammenhang zwischen Spannungstensor und Deformationsgeschwindigkeitstensor. Im Gegensatz dazu besteht bei nicht newtonschen Fluiden ein nichtlinearer Zusammenhang und die Viskosität hängt vom Geschwindigkeitsgradienten ab. Alle in dieser Arbeit verwendeten Fluide sind in sehr guter Näherung als Newtonsche Fluide anzusehen. Für inkompressible Strömungen verschwindet der erste Term in Gleichung (2.7) aufgrund der Kontinuitätsgleichung (2.3). Mit den vorgestellten Newtonschen Fluideigenschaften wird die Gleichung (2.6) als Navier-Stokes-Gleichung bezeichnet:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho\nu \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \rho\nu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right] - \frac{\partial p}{\partial x_j} + \rho g. \quad (2.8)$$

2.1.3 Speziestransportgleichung

Bei der mathematischen Beschreibung von Verbrennungsprozessen als auch bei nicht-reaktiven Mischungsvorgängen muss der Transport von Konzentrationen sichergestellt werden. Hierzu wird eine generelle Transportgleichung, die für eine Vielzahl an Transportprozessen anwendbar ist, für den Transport eines beliebigen Skalars Φ zur Hilfe genommen.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\Phi u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} D_j(\Phi) + S_\Phi \quad (2.9)$$

In Gleichung (2.9) beschreibt der erste Term die zeitliche Änderung von Φ , der zweite den konvektiven Transport mit der Strömung, der dritte die Diffusion mit einem bestimmten Diffusionskoeffizienten D_j und S_Φ gibt einen Quellterm an. In Verbrennungs- oder nicht-reaktiven Mischungsprozessen ist die Bestimmung der zeitlichen und räumlichen Verteilung der beteiligten Spezies α von Interesse. Hierzu werden die Speziesmassenbrüche Y_α , die die Masse der Spezies α auf die Gesamtmasse bezogen darstellen,

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m} \quad (2.10)$$

in die Gleichung (2.9) eingesetzt:

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y_\alpha u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}(J_j^\alpha(Y_\alpha)) + \dot{\omega}_\alpha. \quad (2.11)$$

Die Transporteffekte der Gleichung (2.11) sind analog zur Gleichung (2.9). Lediglich auf der rechten Seite der Gleichung geben J_j^α die diffusiven Flüsse in Abhängigkeit der Spezies α und $\dot{\omega}_\alpha$ den Quellterm infolge von chemischen Reaktionen an. Die Definition des chemischen Quellterms wird im Kapitel 3 näher erläutert. Um die Speziestransportgleichung (2.11) zu schließen, müssen die diffusiven Flüsse über die Kontrollvolumenoberflächen D_j^α bestimmt werden. Dies wird mit Hilfe des Fickschen Gesetzes sichergestellt:

$$J_j^\alpha = \rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j}. \quad (2.12)$$

In Gleichung (2.12) gibt D_α den binären Diffusionskoeffizienten der Spezies α an. Über das Ficksche Gesetz lässt sich mit Hilfe des binären Diffusionskoeffizienten der Spezies eine Diffusionsgeschwindigkeit angeben:

$$V_{j,\alpha} Y_\alpha = -D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j}. \quad (2.13)$$

Setzt man den Diffusionskoeffizienten der Spezies D_α mit der kinematischen bzw. dynamischen Viskosität der Mischung ins Verhältnis, erhält man die dimensionslose Schmidt-Zahl Sc_α .

$$Sc = \frac{\nu}{D_\alpha} = \frac{\mu}{\rho D_\alpha} \quad (2.14)$$

Die Schmidt-Zahl Sc_α gibt das Verhältnis von diffusivem Impuls- zu diffusivem Stofftransport an und zeigt beispielsweise bei Schmidt-Zahlen größer 1 ($Sc_\alpha > 1$) an, dass der Impulstransport dominiert. Setzt man die Definitionen (2.14) und (2.12) in die Speziestransportgleichung (2.11) ein, erhält man eine Gleichung (2.15), die als Basis des Verbrennungsmodellierungsansatzes mittels Mischungsgrad und Reaktionsfortschrittsvariable dient.

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y_\alpha u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Sc_\alpha} \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_\alpha. \quad (2.15)$$

Ein weiterer in der Verbrennungsmodellierung wichtiger Ansatz für den Diffusionskoeffizienten kann aus dem Verhältnis der thermischen Wärmeleitung zur Speziesdiffusion gewonnen werden und wird über die dimensionslose Lewis-Zahl Le definiert

$$Le_\alpha = \frac{\lambda_t/c_p}{\rho D_\alpha}. \quad (2.16)$$

λ_t gibt in Definition (2.16) die Temperaturleitfähigkeit und c_p die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck an. Hiermit ergibt sich die Speziestransportgleichung (2.15) zu

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y_\alpha u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda_t/c_p}{Le_\alpha} \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_\alpha. \quad (2.17)$$

Die erweiterten Herleitungen der Speziestransportgleichung und den genauen Zusammenhang im Kontext der Verbrennungsmodellierung wird im folgenden Kapitel 3 näher erläutert.

2.1.4 Energieerhaltungsgleichung

Für die Beschreibung des Energiegehaltes einer Fluidströmung bietet sich die spezifische Enthalpie h an. Die Enthalpie enthält definitionsgemäß die innere Energie, die potentielle als auch die chemische Energie. Die spezifische Enthalpie h einer Fluidströmung setzt sich aus den einzelnen Enthalpien h_α der enthaltenen, gemischten Spezies N_α zusammen:

$$h = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} h_\alpha Y_\alpha \quad (2.18)$$

Die spezifische Enthalpie der Spezies h_α lässt sich mit Hilfe der kalorischen Zustandsgleichung berechnen und setzt sich aus zwei Teilen zusammen:

$$h_\alpha = h_\alpha^s + \Delta h_{f,\alpha}^0 \quad (2.19)$$

Der erste Teil der Definition (2.19) repräsentiert die temperaturabhängige sensible Enthalpie h_α^s

$$h_\alpha^s = \int_{T_0}^T c_{p,\alpha} dT, \quad (2.20)$$

während der zweite Teil die Standardbildungsenthalpie $\Delta h_{f,\alpha}^0$ abbildet, die bei der chemischen Reaktion der Spezies α erzeugt oder verbraucht wird und experimentell bestimmt werden kann. Mit den gegebenen Informationen und in Anlehnung an die allgemeine Transportgleichung (2.9), lässt sich eine Transportgleichung für die Enthalpie in einer Fluidströmung aufstellen:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h u_j) = \frac{Dp}{Dt} + \tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \dot{\omega}_q + \rho \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} Y_\alpha k_{\alpha,j} V_{\alpha,j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j}. \quad (2.21)$$

Die Gleichung (2.21) enthält auf der linken Seite die zeitliche Änderung der Enthalpie und die konvektiven Flüsse über die Kontrollvolumenoberflächen. Der erste und zweite Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.21) gibt die Enthalpieänderung infolge von Druckschwankungen und viskosen Reibungseffekten an und beide Terme sind im Fall von Strömungen mit geringer Machzahl Ma zu vernachlässigen [92]. Über den dritten Term können externe Quellen in die Enthalpiebilanz eingebracht werden. Dies können beispielsweise Strahlungseffekte, die Enthalpieänderung durch Zündfunken oder andere externe Enthalpiequellen bzw. -senken sein. Der vierte Term in Gleichung (2.21) beschreibt den Enthalpieeintrag durch Volumenkräfte. In dieser Arbeit wirkt, als einzige Volumenkraft die Gravitationskraft auf alle Spezies in gleicher Weise und bringt aufgrund des Zusammenhanges:

$$\sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} Y_\alpha V_{\alpha,j} = 0 \quad \implies \quad \rho k \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} Y_\alpha V_{\alpha,j} = 0 \quad (2.22)$$

keinen Eintrag in die Enthalpiegleichung (2.21). Der letzte Term beschreibt die räumliche Änderung des Wärmeflusses q_j :

$$q_j = -\lambda_t \frac{\partial T}{\partial x_j} + \rho \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} h_\alpha Y_\alpha V_{\alpha,j} \quad (2.23)$$

Der erste Term gibt nach dem Fourierschen Gesetz den Wärmefluss in Abhängigkeit des Temperaturgradienten an, während der zweite den Wärmefluss anhand der Massendiffusion der unterschiedlichen Spezies mit ihren spezifischen Diffusionsgeschwindigkeiten V_α beschreibt. Mit Hilfe der Definition der Lewiszahl Le (2.16) kann der Wärmefluss q_j umgeformt werden zu:

$$q_j = -\frac{\lambda_t}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \frac{\lambda_t}{c_p} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \left(h_\alpha \left(1 - \frac{1}{Le_\alpha} \right) \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right). \quad (2.24)$$

Eine sehr verbreitete Vereinfachung in der Verbrennungssimulation ist die Annahme der konstanten Diffusionskoeffizienten der Spezies $D_\alpha = D$ und die Gleichheit der thermischen Diffusion zur Massendiffusion. Dies führt zu der Annahme der konstanten Lewiszahl $Le_\alpha = 1$ und der Wärmefluss q_j vereinfacht sich zu:

$$q_j = -\frac{\lambda_t}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_j}. \quad (2.25)$$

Mit den genannten Vereinfachungen kann auf Basis der Gleichung (2.21) eine neue Enthalpieerhaltungsgleichung definiert werden:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda_t}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right). \quad (2.26)$$

Eine weitere dimensionlose Kennzahl, die sich im weiteren Verlauf als sehr nützlich erweisen wird, ist die Prandtl-Zahl Pr :

$$Pr = \frac{\mu}{\lambda_t / c_p}. \quad (2.27)$$

Die Prandtl-Zahl (2.27) schafft eine Beziehung zwischen der Viskosität und der Wärmeleitung und ergibt in die Gleichung (2.26) eingesetzt eine sehr gebräuchliche Formulierung der Enthalpieerhaltungsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right). \quad (2.28)$$

In Kapitel 3 werden weiterführende Informationen zu den Erhaltungsgleichungen aus diesem Kapitel gegeben und in den Kontext der Verbrennungsrechnung gesetzt. Die Enthalpiegleichung ist nicht zwingend erforderlich für die Berechnung von reaktiven Strömungen und wurde der Vollständigkeit angegeben.

2.1.5 Zustandsgleichung

Aus der vorgestellten Kontinuitäts- (2.2) und Enthalpiegleichung (2.26) sowie den Navier-Stokes- (2.6) und Speziestransportgleichungen (2.17) erhält man einen Satz von partiellen, gekoppelten Differentialgleichungen. Leider gibt es mehr unbekannte Variablen als Gleichungen, weshalb der Satz von Differentialgleichungen nicht geschlossen ist. Zur Schließung des Gleichungssystems müssen deshalb weitere Gleichungen herangezogen werden, die einen Zusammenhang zwischen unbekannten Variablen herstellen können. Hierzu wird in der vorliegenden Arbeit die Verwendung eines idealen Gases vorausgesetzt, was unter den gegebenen Bedingungen der betrachteten Konfigurationen gerechtfertigt ist. Mit der thermischen Zustandsgleichung bzw. idealen Gasgleichung (2.29) kann die Dichte als Funktion von Druck und Temperatur dargestellt werden:

$$\rho = \frac{pM}{R_m T}. \quad (2.29)$$

Hierin gibt R_m die universelle Gaskonstante ($R_m = 8.314 \text{ J/molK}$) und M die molare Masse der Gasmischung an:

$$M = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{M_\alpha}{Y_\alpha} \quad (2.30)$$

Unter den in dieser Arbeit getroffenen Annahmen der isobaren Verbrennung bei niedrigen Machzahlen verschwindet bei konstant gehaltenem Mischungszustand der Einfluss des Druckes auf die Dichte und der Druck kann auf einen definierten Referenzdruck $p_0 = \text{const.}$ reduziert werden:

$$\rho = \frac{p_0 M}{R_m T}. \quad (2.31)$$

2.2 Strömungen

Strömungen werden in zwei grundlegend unterschiedliche Strömungsphänomene unterteilt. Zum einen gibt es die laminare Strömung, die sich durch eine geordnete, geradlinige Bewegung von Fluidteilchen auszeichnet und zum anderen die chaotische, dreidimensionale, instationäre, durch Wirbelstrukturen gekennzeichnete turbulente Strömung. Die meisten in der Realität vorherrschenden Strömungen zeigen ein turbulentes Verhalten. Turbulente Strömungen sind durch ihre fluktuierende Strömungsbewegung charakterisiert. Durch die fluktuierende Bewegung wird ein verstärkter Austausch von Impuls, Energie und Spezieskonzentrationen hervorgerufen. Aus Turbulenzeffekten können enorme Veränderungen der Strömungseigenschaften resultieren, die im Vergleich zu laminaren und nicht viskosen Strömungen eine differenzierte Behandlung erfordern. Die Unterscheidung der zwei Strömungsformen anhand einer charakteristischen Kennzahl, der Reynolds Zahl Re (2.32), wurde erstmal von Osborne Reynolds im Jahr 1883 gezeigt [96], indem er einer Rohrströmung Farbe zuführte. Bei laminaren Rohrströmungen besteht zwischen dem Druckabfall und dem Volumenstrom unterhalb einer kritischen Reynoldszahl ein proportionaler Zusammenhang. Oberhalb dieser kritischen Reynoldszahl verändert sich die Strömungsform und es treten die oben erwähnten dreidimensionalen, instationären Verwirbelungen auf, mit denen ein starker Anstieg des Druckabfalls proportional zum Quadrat des Volumenstroms einhergeht. Dies lässt sich durch die starken Rotationen und den hiermit verbundenen erhöhten Impulsaustausch bei turbulenten Strömungen erklären. Die Bestimmung der Reynoldszahl erfolgt anhand der charakteristischen Strömungsgeschwindigkeit U , einer charakteristischen Länge L sowie der fluidspezifischen kinematischen Viskosität ν über die Gleichung 2.32:

$$Re = \frac{\rho U^2}{\mu U/L} = \frac{UL}{\nu}. \quad (2.32)$$

Die Reynoldszahl gibt allgemein verständlicher das Verhältnis von Trägheitskräften zu Zähigkeitskräften an:

$$Re = \frac{\text{Trägheitskräfte}}{\text{Zähigkeitskräfte}}. \quad (2.33)$$

Die kritischen Reynoldszahl Re_{krit} ab der ein Umschlag von einer laminaren zu einer turbulenten Strömung erfolgt, der als Transition bezeichnet wird, markiert nicht einen bestimmten Punkt, sondern eher einen schmalen Bereich, in dem sich die Strömungsform in Abhängigkeit von der lokalen Strömungsgeschwindigkeit sowie der lokalen Viskosität verändert. Der Übergangsbereich zwischen der laminaren und voll turbulenten Strömungsbewegung wird als Intermittenzgebiet bezeichnet. Der Begriff der Transition wird in der linearen Stabilitätstheorie begründet, die die Ursache für den Umschlag in einem Anwachsen von wellenförmigen Störungen der Zustandsgrößen Geschwindigkeit und Druck erklärt. Im Bereich der Transition oberhalb der kritischen Reynoldszahl reichen die Dämpfungseigenschaften des viskosen Fluids nicht mehr aus, um die entstehenden zweidimensionalen Primärinstabilitäten zu dämpfen. Über die zweidimensionalen Primärinstabilitäten entstehen durch Deformationsvorgänge dreidimensionale Sekundärinstabilitäten, aus denen sich die Turbulenz ausbildet [94]. Die kritische Reynoldszahl ist stark von der problemspezifischen Zuströmung abhängig. So gilt als erster Anhaltspunkt für den Übergang zur turbulenten Strömung in technischen Systemen eine kritische Reynoldszahl von $Re_{krit} = 2300$.

Jedoch wurden bei optimalen bzw. störungsfreien Zuströmungen kritische Reynoldszahlen bis $Re_{krit} = 40000$ gemessen [1]. Die kennzeichnenden Charakteristika für turbulente Strömungen sind:

- instationär
- dreidimensional
- wirbelbehaftet
- dissipativ
- unregelmäßig in Ort und Zeit.

2.3 Beschreibung turbulenter Strömungen

In technischen Verbrennungssystemen sind mit wenigen Ausnahmen größtenteils turbulente Strömungen anzutreffen. Dies liegt zum einen an den meist geringen Abmessungen technischer Verbrennungssysteme, der geringen Viskosität von gasförmigen Fluiden und an den oft gewünscht guten Mischungseigenschaften von turbulenten Strömungen. Ausgebildete turbulente Strömungen haben einen eingangs erwähnten chaotischen, dreidimensionalen, dissipativen und wirbelbehafteten Charakter, der auf die geringen Dämpfungseigenschaften von kleinen Störungen zurückzuführen ist. Nach dem Umschlag von der laminaren zur turbulenten Strömung sind die Strömungsgrößen Zufallsgrößen und eine Betrachtung der instantanen Strömungsgrößen lässt keinen Rückschlüsse auf die vorherrschenden Strömungsphänomene zu. Zur mathematischen Beschreibung turbulenter Strömungen bietet es sich an, die Strömungsgrößen, wie beispielsweise im weiteren Verlauf die Geschwindigkeiten, in einen Haupt- oder Grundströmungsanteil sowie einen ungeordneten, stochastischen Schwankungsanteil zu separieren. Die momentane Geschwindigkeit lässt sich folgendermaßen darstellen:

$$u_i(x_j, t) = \bar{u}_i(x_j, t) + u'_i(x_j, t). \quad (2.34)$$

In der Gleichung (2.34) repräsentiert der erste Term den räumlichen und zeitlichen Mittelwert der Strömungsgeschwindigkeit \bar{u}_i und wird auch als erstes statistisches Moment bezeichnet, während der zweite Term die der Grundströmungsgeschwindigkeit \bar{u}_i überlagerte turbulente Fluktuation u'_i angibt. Für statistisch instationäre Prozesse ist es möglich den Mittelwert und auch andere mittlere Größen über eine Ensemble Mittelung zu berechnen:

$$\bar{u}_i(x_j, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n u_i^{(k)}(x_j, t), \quad (2.35)$$

während es für statistisch stationäre Prozesse ausreichend ist eine zeitliche Integration über die instantane Geschwindigkeit an einem festen Ort durchzuführen:

$$\bar{u}_i(x_j) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} u_i(x_j, t) dt. \quad (2.36)$$

Mit Hilfe des Mittelwertes lassen sich statistische Informationen zu den Schwankungsanteilen der Strömung angeben. Hierzu kann das zweite Moment bzw. die Varianz berechnet

werden:

$$\overline{u_i''^2}(x_j) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} \left(u_i(x_j, t) - \overline{u_i(x_j, t)} \right)^2 dt. \quad (2.37)$$

Um eine bessere Vorstellung der Schwankungsgrößen einer turbulenten Strömung an einem bestimmten Ort zu erhalten, kann aus der Varianz die Standardabweichung bzw. RMS-Wert (Root-Mean-Square) vom Mittelwert gebildet werden:

$$u_{rms} = \sqrt{\overline{u_i''^2}(x_j)}. \quad (2.38)$$

Eine turbulente Strömung ist durch eine Vielzahl von charakteristischen Längen- und Zeitskalen spezifiziert. Die größten Skalen bzw. Wirbel sind durch die geometrischen Abmessungen vorgegeben, während die kleinsten turbulenten Skalen, die Kolmogorov-Skalen η_K [65], von den Fluideigenschaften, genauer von der Dissipation ϵ infolge von Viskositätseffekten abhängen. Die größten turbulenten Längen- und Zeitskalen lassen sich über eine Zweipunktkorrelation der turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen erzielen. Bei einer Zweipunktkorrelation wird eine Verknüpfung von einer Strömungsgröße, wie z.B. der Geschwindigkeitsfluktuation, an zwei unterschiedlichen Orten zu unterschiedlichen Zeitpunkten durchgeführt:

$$R_{ij}(x, t, \Delta x, \Delta t) = \overline{u'_i(x, t) u'_j(x + \Delta x, t + \Delta t)}. \quad (2.39)$$

Zum besseren Verständnis wird meist eine Normierung der Zweipunktkorrelation angegeben:

$$R_{ij, Norm}(x, t, \Delta x, \Delta t) = \frac{\overline{u'_i(x, t) u'_j(x + \Delta x, t + \Delta t)}}{\left[\overline{u_i'^2(x, t)} \cdot \overline{u_j'^2(x + \Delta x, t + \Delta t)} \right]^{1/2}}. \quad (2.40)$$

Mit Hilfe der Zweipunktkorrelation der Geschwindigkeitsfluktuationen können das Integrale-Längenmaß und das Integrale-Zeitmaß einer turbulenten Strömung charakterisiert werden, die ein räumliches und zeitliches Maß für die größten turbulenten Skalen darstellen. Für das Integrale-Längenmaß wird die Zweipunktkorrelation häufig entlang einer Strecke, z.B. in x_1 -Richtung, bei konstanter Zeit integriert und somit ein longitudinales Integrales-Längenmaß berechnet:

$$l_{I,11} = \frac{1}{\overline{u_1'^2}(x_1, t)} \int_0^\infty R_{11}(x_1, t, \Delta x_1, 0) dx_1. \quad (2.41)$$

Entsprechend wird zur Bestimmung des Interale-Zeitmaßes an einen festen Ort über eine Zeitspanne integriert:

$$t_{I,11} = \frac{1}{\overline{u_1'^2}(x_1, t)} \int_0^\infty R_{11}(x_1, t, 0, \Delta t) dt. \quad (2.42)$$

Turbulente Strömungen zeichnen sich dadurch aus, dass die großskaligen und energie-reichen Strukturen, erzeugt durch den mittleren Geschwindigkeitsgradienten, im Laufe der Zeit ihre Energie an kleinskaligere und energieärmere Strukturen abgeben und die

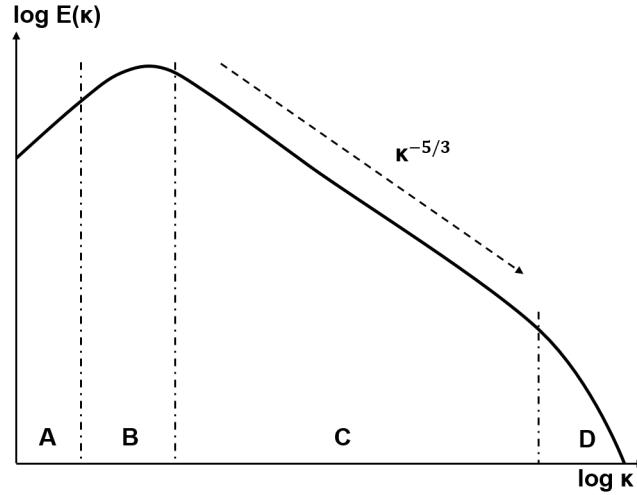


Abbildung 2.1: Energiekaskade

kleinsten Strukturen, die vorher erwähnten Kolmogorov Skalen η_K letztendlich, infolge der fluidspezifischen Viskositätskräfte dissipieren und ihre Energie in Form von Wärme abgeben. Dieser Zerfallsprozess wurde von Richardson 1922 mit Hilfe einer Energiekaskade, wie in Abbildung 2.1 zu sehen, beschrieben [98]. Anhand der Energiekaskade, die ein spektrales Energiespektrum der turbulenten kinetischen Energie k darstellt, können die unterschiedlichen Längenskalen einer turbulenten Strömung anschaulich dargestellt werden. Die turbulente kinetische Energie k gibt ein Maß für die Energie der turbulenten Schwankungen an und ist definiert über:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i}. \quad (2.43)$$

Die Energiekaskade in Abbildung 2.1 beschreibt die Verteilung der turbulenten kinetischen Energie k über der Wellenzahl $\kappa = 2\pi/l$, welche die räumlichen Abmessungen der Wirbel repräsentiert. Richardson definierte Bereiche, die nach ihren unterschiedlichen energetischen Transportverhalten unterteilt sind:

In der Energiekaskade Abbildung 2.1 wird der anfängliche Anstieg in Abschnitt A als Produktions- oder auch Injektionsbereich bezeichnet. Hier führt die Strömung Energie auf die großen, geometrieabhängigen Skalen zu und erzeugt im fließenden Übergang, gekennzeichnet mit B, Wirbel die sich in der Größenordnung des Integralen-Längenmaßes l_I befinden. In diesem Bereich des Energiespektrums dominieren die Trägheitskräfte gegenüber den viskosen Kräften und es lässt sich mit Hilfe des Integralen-Längenmaßes und den Geschwindigkeitsfluktuationen u' nach der Definition 2.32 eine turbulente Reynoldszahl Re_t bilden, die in technischen Verbrennungssystemen zwischen 100 - 2000 liegt [92]:

$$Re_t = \frac{u' l_I}{\nu} \quad (2.44)$$

Im Anschluss folgt der Transport- oder auch Trägheitsbereich C, in dem die Energie der großen Skalen durch Wirbelstreckungsprozesse auf kleinere Skalen übertragen wird. Im letzten Abschnitt D erfolgt der Prozess der Dissipation auf den kleinsten Skalen,

den Kolmogorov-Skalen η_K . In diesem Bereich nehmen die viskosen Spannungen wegen der steigenden Geschwindigkeitsgradienten innerhalb der Wirbel stark zu und wirken der Wirbelbewegung entgegen [94], was aus der Definition der spezifischen Dissipation ersichtlich wird:

$$\epsilon = \nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_j}{\partial x_i}}. \quad (2.45)$$

Unter der Voraussetzung der lokalen, isotropen, homogenen Turbulenz auf den kleinsten Skalen traf Kolmogorov [65] die Annahme, dass die sogenannten Kolmogorovschen Längen- und Zeitmaße der Wirbel ausschließlich Funktionen der spezifischen Dissipationsrate ϵ und der Viskosität ν sind [65].

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (2.46)$$

$$\tau_\eta = \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} \quad (2.47)$$

Ein weiterer Zusammenhang, der auf Kolmogorov zurückgeht, ist das $-5/3$ -Gesetz in Abschnitt C der Energiekaskade in Abbildung 2.1. Kolmogorov postuliert, dass die Energiedichte im Trägheitsbereich mit einem Exponenten von $-5/3$ abfällt und somit die Energie verteilt wird (Produktion=Dissipation). Aus der Energiekaskade wird ersichtlich, dass turbulente Strömungen einen sehr weiten Bereich an Längen- und Zeitskalen beinhalten. Dies ist ein Grund, warum die numerische Berechnung oder die experimentelle Messung von turbulenten Strömungen besonders aufwendig bis teilweise unmöglich ist. Dieser Zusammenhang wird ersichtlich, wenn man die fluidspezifische Dissipation ϵ als Quotienten der turbulenten kinetischen Energie über dem turbulenten Zeitmaß abschätzt [94]:

$$\epsilon = \frac{u'^3}{l_I} \quad (2.48)$$

und mit Gleichung (2.44), (2.46) und (2.47) zu einem Zusammenhang umstellt, der auf einen Skalenunterschied in Bezug zur Reynoldszahl Re führt:

$$\frac{l_I}{\eta_k} = Re^{3/4}. \quad (2.49)$$

Die Definition (2.49) zeigt auf, dass bei einer Erhöhung der Reynoldszahl die Anzahl der turbulenten Skalen ebenfalls ansteigt und der Aufwand zur numerischen Berechnung steigt. Aus diesem Grund wird verstärkt der Einsatz von numerischen Berechnungsverfahren zur Berechnung von turbulenten Strömungsprozessen vorangetrieben.

Für die mathematische Modellbildung von turbulenten Strömungen ist es meist hilfreich von idealisierten Strömungsformen abzuleiten. Von besonderem Interesse sind die homogene und die isotrope Turbulenz. Von homogener Turbulenz spricht man, wenn alle Feldgrößen homogen sind und damit unabhängig vom Ort. Bei isotroper Turbulenz kommt zu der vereinfachenden Annahme der Ortsunabhängigkeit (Homogenität) noch die Rotationsunabhängigkeit der Feldgrößen hinzu.

2.4 Turbulenzmodellierung

Sowohl für die Berechnung laminarer als auch turbulenter Strömungen sind die in Kapitel 2.3 vorgestellten Gleichungen gleichermaßen gültig. Im weiteren Verlauf wird auf die Berechnung von turbulenten Strömungen näher eingegangen, da laminare Strömungen, wie schon eingangs erwähnt, in Verbrennungssystemen selten anzutreffen sind. Zur numerischen Berechnung von turbulenten Strömungen gibt es eine Vielzahl von Vorgehensweisen, die sich grob in 3 Kategorien einteilen lassen [87]. In Abbildung 2.2 wird eine vergleichende Gegenüberstellung von Modellierungs- zu Rechenaufwand der 3 Kategorien der im Anschluss vorgestellten Turbulenzmodellierungsstrategien gezeigt. In dieser Arbeit wird auf die verwendete Grobstruktursimulation (engl. *Large-Eddy Simulation*, kurz LES) näher eingegangen.

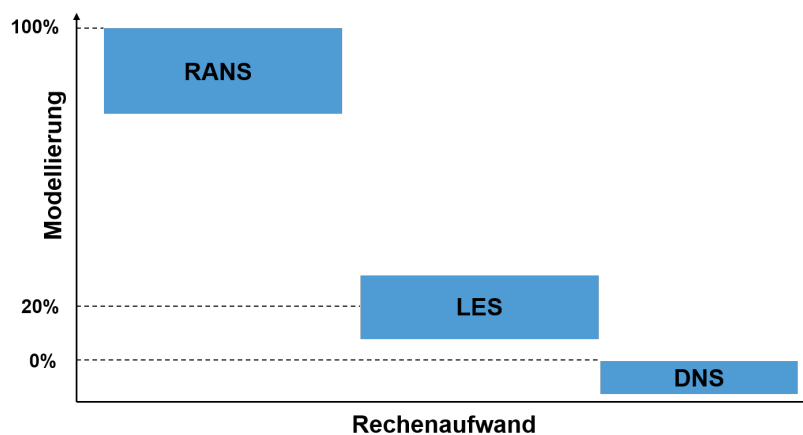


Abbildung 2.2: Gegenüberstellung der 3 Modellierungsstrategien für turbulente Strömungen im Verhältnis von Modellierungs- zu benötigtem Rechenaufwand

2.4.1 Direkte numerische Simulation (DNS)

Die DNS stellt die genaueste numerische Lösung eines Strömungsproblems dar. Für eine direkte numerische Simulation müssen alle turbulenten Strömungsbewegungen bzw. Skalen vollständig durch das numerische Gitter aufgelöst werden. Das bedeutet, dass selbst die kleinsten Wirbelstrukturen, die Kolmogorov-Längenmaße (2.46), auf dem numerischen Gitter aufgelöst werden müssen, um die komplette Strömung bis auf den numerischen Fehler korrekt berechnen zu können. Bei der DNS werden die aus Kapitel 2.1 vorgestellten Gleichungen direkt gelöst ohne, wie bei den im Anschluss gezeigten Methoden, eine Modellierung der turbulenten Schwankungen vorzunehmen. Bei einer DNS wird, wie in Abbildung (2.3) gezeigt, das komplette Energiespektrum einer turbulenten Strömung aufgelöst. Leider ist der Aufwand bei der direkten numerischen Simulation durch die notwendige, feine Diskretisierung des Rechengebietes extrem hoch, was sich in der Rechenzeit und somit in den Kosten widerspiegelt. Die Rechenzeit einer DNS ist proportional mit der dritten Potenz der vorherrschenden Reynoldszahl Re^3 , weshalb eine direkte numerische Simulation heutzutage nur sehr begrenzt und meist nur für sehr spezielle Anwendungen einsetzbar ist. In Bereichen, wo es jedoch nicht

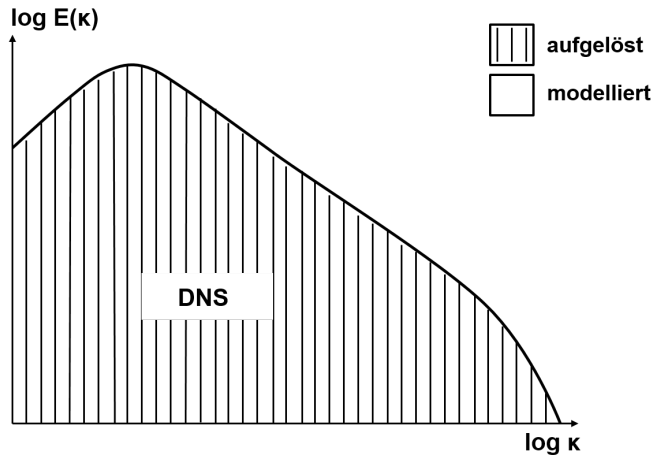


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der aufgelösten turbulenten kinetischen Energie bei einer DNS

möglich ist Experimente durchzuführen, ist die DNS ein gutes Werkzeug. Durch die hohe räumliche und meist auch zeitliche Auflösung liefert die DNS für alle Variablen wichtige Informationen zu jedem Zeitpunkt.

2.4.2 Reynolds-gemittelte-Navier-Stokes-Gleichungen (RANS)

Die RANS-Methoden (engl. *Reynolds-Averaged-Navier-Stokes* kurz RANS) werden weltweit am häufigsten für die Berechnung von turbulenten Strömungen eingesetzt. Zur Beschreibung einer turbulenten Strömung lässt sich, wie in Kapitel 2.3 beschrieben, die instantane Strömungsbewegung ϕ durch eine zeitliche Mittelung in einen Mittelwert $\bar{\phi}$ und eine ungeordnete, stochastische Schwankungsgröße ϕ' aufteilen [1]. Die benötigte numerische Rechenkapazität sinkt durch die vorhergehende Mittelung der beschreibenden Gleichungen extrem, im Vergleich zu der oben vorgestellten DNS. Für jede Variable ϕ einer Strömung gilt [87]

$$\phi(x_i, t) = \bar{\phi}(x_i) + \phi'(x_i, t). \quad (2.50)$$

Setzt man die Gleichung (2.50) in die allgemeinen Navier-Stokes-Gleichungen aus Kapitel 2.1 ein und führt eine Mittelung durch, erhält man unter Beachtung der für stochastische Größen gültigen Rechenregeln die Reynolds-gemittelten-Navier-Stokes-Gleichungen (RANS-Gleichungen). Durch die Berechnung von zeitlich gemittelten Größen ist eine deutliche Reduzierung der räumlichen und zeitlichen Auflösung erreichbar. In diesen zeitlich gemittelten Gleichungen treten nicht geschlossene Terme der turbulenten Schwankungsgrößen ϕ' auf, die modelliert werden müssen. Aufgrund der zeitlichen Mittelungsverfahren werden die RANS-Methoden auch als statistische Turbulenzmodelle bezeichnet. Im Vergleich zur DNS wird bei den statistischen Turbulenzmodellen, wie in Abbildung (2.4) gezeigt, das komplette Energiespektrum einer turbulenten Strömung modelliert, wodurch sich ein starker Einfluss von Modellfehlern in den Ergebnissen zeigen kann. Die RANS-Methoden liefern mit Ausnahme der zeitlich aufgelösten Unsteady-RANS (URANS) zeitlich gemittelte Informationen der Strömungsgrößen. Aufgrund der angenomme-

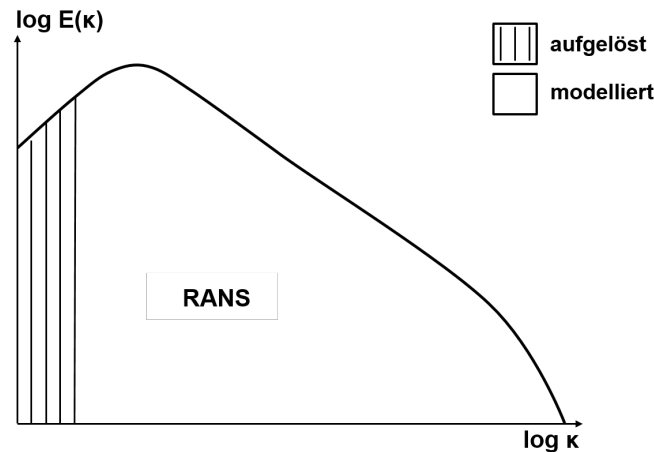


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der aufgelösten turbulenten kinetischen Energie bei einer RANS

nen Vereinfachung ist die Güte der Ergebnisse im Vergleich zu einer DNS stark reduziert.

2.4.3 Grobstruktursimulation (LES)

Die Grobstruktursimulation (*Large Eddy Simulation* kurz LES) ist konzeptionell zwischen der DNS und den RANS-Methoden einzuordnen. Wie in Kapitel 2.3 angesprochen, handelt es sich bei einer turbulenten Strömung um ein Mehrskalensphänomen, was anschaulich in Abb. 2.1 anhand der Energiekaskade gezeigt wurde. Bei der LES werden die großen, energiereichen Wirbelstrukturen bzw. Skalen (engl. *Large Eddy's*), wie bei der DNS, auf dem numerischen Gitter aufgelöst, während die kleinen, energiearmen Skalen, die sogenannten Feinstrukturskalen (engl. *Subgrid-Scales* kurz SGS), durch ein geeignetes Modell ähnlich wie bei den RANS-Methoden modelliert werden. Hierbei nutzt die LES die unterschiedlichen Eigenschaften von großen zu kleinen Skalen aus, indem die durch die individuelle Konfiguration gegebenen großen, energiereichen Skalen mit ihrem Energietransport und den Zerfallsmechanismen aufgelöst werden und die kleinen energiearmen, homogenen, isotropen, geometrieunabhängigen Skalen durch eine sogenannte Feinstrukturmodellierung abgebildet werden. Die Funktion der Feinstrukturmodellierung besteht darin, die Dissipation ϵ der turbulenten kinetischen Energie k auf den kleinen Skalen abzubilden. Aufgrund der genannten Eigenschaften der kleinen Skalen kann diese Modellierung leicht über einen Wirbelviskositätsansatz nach der Hypothese von Boussinesq erfolgen. Hierbei wird durch eine zusätzliche turbulente Viskosität ν_t eine Erhöhung der Dissipation sichergestellt. Bei der Grobstruktursimulation wird im Gegensatz zu der zeitlichen Mittelung bei den statischen Turbulenzmodellen eine räumliche Filterung durchgeführt. Der Vorteil der im LES Kontext durchgeführten Filterung ist die bestehenbleibende Orts- und Zeitabhängigkeit der gefilterten Größe, was bei einer Mittelung nicht mehr gegeben ist [43]. Hierbei werden die großskaligen energiereichen Wirbel nach den allgemeinen Navier-Stokes-Gleichungen aus Kapitel 2.1 gelöst und somit ein Großteil der turbulenten Fluktuationsbewegungen der Strömung wiedergegeben. Je nach Genauigkeitsanforderung der LES werden circa 80% des Energiespektrums, wie in Abbildung 2.5 gezeigt, aufgelöst und der verbleibende Anteil durch geeignete Modelle modelliert. Im Grenzfall einer unendlich feinen räumlichen Mit-

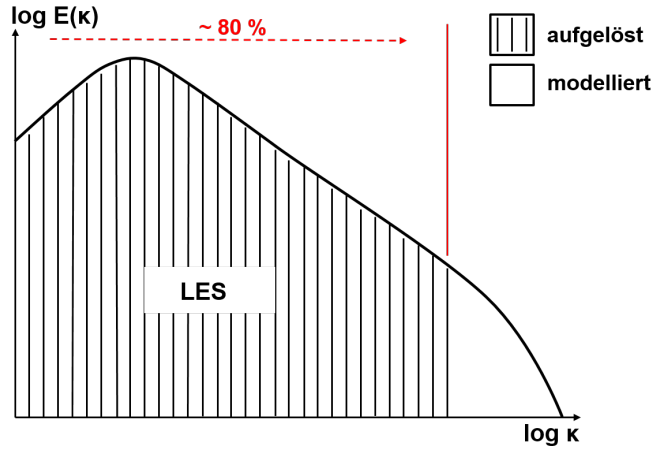


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung der aufgelösten turbulenten kinetischen Energie bei einer LES

lung (Filterung) geht die LES über in eine direkte numerische Simulation (DNS). Die LES hat gegenüber der DNS den Vorteil, dass die kleinsten Wirbelstrukturen nicht aufgelöst werden müssen, wodurch sie vom Rechenaufwand und den Kosten geringer anzusetzen ist als die DNS.

2.4.3.1 Filterung

Ausgangspunkt für die LES ist eine Separation der Skalen, die durch die räumliche Filterung der Erhaltungsgleichungen aus Kapitel 2.1 erzielt wird. Durch die räumliche anstatt einer zeitlichen Filterung bleibt bei einer LES die Fähigkeit bestehen, instationäre Prozesse zu beschreiben. Eine der gebräuchlichsten räumlichen Filteroperationen für die Separation der kleinskaligen Anteile wurde von Leonard [72] vorgestellt:

$$\bar{\phi}(x_i, t) = \int_V \phi(x_i - r_i, t) \zeta(r_i) dr_i. \quad (2.51)$$

Der räumlich und zeitlich variierende, beliebige Skalar ϕ wird mit der Filterfunktion ζ im gesamten Rechengebiet integriert. Die Filterfunktion ζ stellt eine normierte Gewichtung dar und wird im Falle dieser Arbeit durch einen sogenannten Abschneidefilter repräsentiert. Prinzipiell sind eine Vielzahl an unterschiedlichen Filterfunktionen anwendbar [94]. In der vorliegenden Arbeit wird zur Diskretisierung des Rechengebietes ein Finite-Volumen Verfahren zugrunde gelegt, weshalb sich eine implizite räumliche Filterung mit Hilfe des numerischen Rechengitters anbietet [102]. Somit ergibt sich im physikalischen Raum ein Top-Hat oder Box-Filter mit der Filterweite $\Delta = \Delta x_i = \Delta V^{1/3}$, mit dem eine räumliche Mittelung der Variable ϕ über das Volumen V der Kontrollvolumenzelle ergibt. Um Strömungen mit variabler Dichte, wie sie in Verbrennungssimulationen vorkommen, ohne zusätzlichen Modellierungsaufwand von nicht geschlossenen Termen behandeln zu können, ist es sinnvoll eine dichtegewichtete Mittelung nach Favre [32] durchzuführen:

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}}. \quad (2.52)$$

Durch die Filterung der Variablen ϕ ergibt sich ein aufgelöster Grobstrukturanteil $\tilde{\phi}$ und ein nicht aufgelöster Feinstrukturanteil ϕ^{sgs} :

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi^{sgs}. \quad (2.53)$$

Wird die gezeigte räumliche Filterung mit der dichtegewichteten Favre Mittelung auf die Massenerhaltungsgleichungen (2.2), die Impulserhaltungsgleichung (2.8) und die Speziestransportgleichung (2.15) aus Kapitel 2.1 angewendet, so gelangt man unter der Voraussetzung der Kommutativität:

$$\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_i} = \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_i}, \quad (2.54)$$

und der Annahme, dass die Viskosität und die Geschwindigkeitsgradienten unkorreliert sind [39]:

$$\mu \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \approx \bar{\mu} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}, \quad (2.55)$$

auf räumlich gefilterte, Favre gemittelte Erhaltungsgleichungen:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0, \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\mu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \bar{\rho} g_i - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}. \quad (2.57)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\mu} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} \right) + \bar{\omega}_\alpha. \quad (2.58)$$

Die Gleichungen (2.57), (2.58) enthalten im konvektiven Anteil einen Korrelationsterm $\widetilde{u_i u_j}$, $\widetilde{Y_\alpha u_j}$, der nicht geschlossen ist und einer Modellierung unterzogen werden muss. Hierzu werden die Terme in einen aufgelösten Grobstrukturanteil und einen nicht aufgelösten Feinstrukturanteil τ_{ij}^{sgs} bzw. $\tau_{Y_\alpha}^{sgs}$ zerlegt:

$$\widetilde{u_i u_j} = \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \tau_{ij}^{sgs}, \quad (2.59)$$

$$\widetilde{u_j Y_\alpha} = \tilde{u}_j \tilde{Y}_\alpha + \tau_{Y_\alpha}^{sgs}. \quad (2.60)$$

Setzt man die Definitionen (2.59) und (2.60) in die Erhaltungsgleichungen (2.57), (2.58) ein erhält man:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\mu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{\partial \bar{\rho} \tau_{ij}^{sgs}}{\partial x_j} - \frac{\bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i. \quad (2.61)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\mu} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial \bar{\rho} \tau_{Y_\alpha}^{sgs}}{\partial x_j} + \bar{\omega}_\alpha. \quad (2.62)$$

Die Feinstrukturspannungen τ_{ij}^{sgs} bzw. $\tau_{Y_\alpha}^{sgs}$ geben formal den Unterschied zwischen den gefilterten und ungefilterten Erhaltungsgleichungen an. Sie schaffen damit die Verbindung zwischen den Grobstruktur- und den Feinstrukturanteilen [39].

2.4.3.2 Modellierung der Feinstrukturspannungen τ^{sgs}

Wie erwähnt, bilden die Feinstrukturspannungen τ^{sgs} die Verbindung zwischen den aufgelösten und nicht aufgelösten Strömungsanteilen. Zur Schließung der Differentialgleichungen müssen die Feinstrukturspannungen über die bekannten, aufgelösten Größen modelliert werden. Die Schwierigkeit besteht darin, dass eine für zahlreiche Strömungstypen konsistente Modellierung gefunden werden muss. Hierbei zeigt sich im Vergleich zu den statistischen Turbulenzmodellen der Vorteil der LES, dass nur die kleinen, energiearmen, isotropen und geometrieunabhängigen Skalen modelliert werden müssen. Es lassen sich mit den lokal aufgelösten Größen sehr einfache Modellierungen der Feinstrukturspannungen finden, auf die in dieser Arbeit nicht weiter eingegangen werden soll. Die heute am häufigsten verwendeten Modellierungsansätze verwenden einen Wirbelviskositätsansatz, um die Eigenschaften der Feinstrukturspannungen τ^{sgs} zu modellieren. Im weiteren Verlauf werden die in dieser Arbeit verwendeten Modellierungsansätze, die alle auf dem Wirbelviskositätsansatz basieren, vorgestellt.

Smagorinsky-Modell

Das bekannteste Modell zur Schließung des Feinstrukturspannungstensors τ^{sgs} wurde von Smagorinsky 1963 [110] vorgestellt. Auf Basis des Wirbelviskositätsansatzes wird angenommen, dass die feinen, nicht aufgelösten Strukturen eine erhöhte Durchmischung hervorrufen und diese in ihrer globalen Wirkung vergleichbar mit der molekularen Viskosität agiert. Die dissipative Wirkung der Feinstrukturspannungen wird über das Einbringen einer turbulenten Scheinviskosität ν_t vorgenommen:

$$\nu_{eff} = \nu + \nu_t. \quad (2.63)$$

Hiermit lautet die Approximation des Feinspannungstensors τ_{ij}^{sgs} in der Impulsgleichung (2.61):

$$\tau_{ij}^{sgs} - \tau_{kk}^{sgs} \delta_{ij} \approx -2\nu_t \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right). \quad (2.64)$$

In die Modellierung der Feinstrukturspannungen gehen nur die deviatorischen Anteile des Spannungstensors τ_{ij}^{sgs} ein. Der isotrope Anteil τ_{kk}^{sgs} in Definition (2.64) repräsentiert einen konvektiven Impulstransport in die Hauptkoordinatenrichtungen und kann somit als zusätzlicher Druckterm in der Impulsgleichung aufgeprägt werden:

$$P = \bar{p} + \frac{1}{3} \bar{\rho} \tau_{kk}^{sgs} \delta_{ij}. \quad (2.65)$$

\tilde{S}_{ij} in Definition (2.64) ist ein Deformationsgeschwindigkeitstensor, der die Streckungsrate innerhalb des Fluides wiedergibt und ist als Funktion der aufgelösten lokalen Geschwindigkeitskomponenten definiert:

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.66)$$

Zur Bestimmung der turbulenten Viskosität ν_t wird beim Smagorinsky-Modell neben der Definition der Streckungsrate (2.66) die verwendete Filterweite Δ und eine theoretische hergeleitete Modellkonstante C_s verwendet:

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 \|\tilde{S}_{ij}\| \quad \text{mit} \quad \|\tilde{S}_{ij}\| = \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}}. \quad (2.67)$$

Mit dem allgemeinen Ansatz von Smagorinsky lassen sich unter definierten Voraussetzungen gute Ergebnisse erzielen. Ein gravierender Nachteil des Modells ist in der festgelegten Modellkonstante C_s begründet. Diese muss vor der Simulation festgelegt werden und zeigt eine starke Abhängigkeit von der Konfiguration, dem verwendeten Gitter und ist in der Realität nicht räumlich konstant. Die Werte für die Modellkonstante C_s variieren abhängig von der Konfiguration und Strömung sehr stark und die Konstante geht in die Berechnung der Viskosität ν_t quadratisch ein, womit sich bei falsch gewählter Konstante ein starker Modellfehler ergibt. Besonders stark zeigt sich diese Schwäche des Modells im wandnahen Bereich. Hier kann das Modell nicht zwischen turbulenten Fluktuationen und laminaren im statistischen Mittel existierenden Gradienten unterscheiden. Somit erzielt das Modell im wandnahen Bereich in der viskosen Unterschicht die größten Gradienten und erzeugt eine überhöhte turbulente Viskosität ν_t , obwohl in diesem Bereich eine laminare Strömung anzutreffen ist, in der die turbulente Viskosität ν_t gegen Null tendieren sollte. Eine starke Überschätzung der Dissipation im wandnahen Bereich ist die Folge. In der Literatur werden für C_s Werte zwischen 0.065-0.24 angegeben. Unter der Annahme der homogenen, isotropen Turbulenz ergibt sich ein theoretischer Wert $C_s \approx 0.2$.

Analog zu den gezeigten Herleitungen der Feinstrukturterme τ_{ij}^{sgs} der Impulsgleichung wird der Feinstrukturterm in der Speziestransportgleichung $\tau_{Y_\alpha}^{sgs}$ über einen Gradientenflussansatz approximiert. Hierzu werden die bei der Herleitung der Speziestransportgleichung verwendeten Annahmen aus Kapitel 2.1 zu Grunde gelegt und durch die turbulente Scheinviskosität ν_t erweitert, um die Annahme der verstärkten Durchmischung im Bereich der nicht aufgelösten Feinstruktur abzubilden:

$$\tau_{Y_\alpha}^{sgs} \approx -\frac{\nu_t}{Sc_{\alpha,t}} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j}. \quad (2.68)$$

In Definition (2.68) wird eine turbulente Schmidt-Zahl $Sc_{\alpha,t}$ definiert die unter der Annahme der identischen Diffusionskoeffizienten $D_\alpha = D$ einen allgemein gültigen Charakter erhält und nicht mehr von der Spezies abhängt.

$$Sc = Sc_{\alpha,t} = Sc_t = 0.7 \quad (2.69)$$

Setzt man die gezeigten Definitionen in die Impulsgleichung (2.61) und die Speziestransportgleichung (2.62) ein, erhält man geeignete LES Gleichungen für die Simulation von Verbrennungsprozessen:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\bar{\mu} + \mu_t) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - (\bar{\mu} + \mu_t) \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i, \quad (2.70)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{(\bar{\mu} + \mu_t)}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} \right) + \bar{\omega}_\alpha. \quad (2.71)$$

Germano-Modell

Eine Weiterentwicklung des Smagorinsky-Modells wurde von Germano et al. im Jahr 1991 publiziert [44]. In diesem Modell wird die feste Modellkonstante C_s aus dem Smagorinsky-Modell über eine dynamische Prozedur abhängig von Ort und Zeit berechnet und die Nachteile des Smagorinsky-Modells beseitigt. Germano verwendete hierzu eine spezielle Filteroperation indem er die dynamische Modellkonstante C_g aus den kleinsten aufgelösten Strukturen berechnet. Germano's Idee hierbei war, dass sich die kleinsten aufgelösten Strukturen ähnlich verhalten wie die nicht aufgelösten Feinstrukturen. Um die Informationen der kleinsten aufgelösten Strukturen zu erhalten, wird im Vergleich zur ersten Filterung mit der Filterweite Δ eine zweite Filteroperation mit einem um $\alpha > 1$ größeren Filter durchgeführt:

$$\hat{\Delta} = \alpha \cdot \Delta. \quad (2.72)$$

Wendet man die zweite Filterung auf die Gleichung (2.59) und auf das ungefilterte Geschwindigkeitsfeld an:

$$\widehat{u_i u_j} = \widehat{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} + \widehat{\tau_{ij}^{sgs}}, \quad (2.73)$$

$$\widehat{u_i u_j} = \hat{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} + \tau_{ij}^{test}, \quad (2.74)$$

und führt die beiden Definitionen zusammen, erhält man die Germano-Identität bzw. den Spannungstensor nach Leonard L_{ij} :

$$L_{ij} := \widehat{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \hat{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} = \widehat{\tau_{ij}^{sgs}} - \tau_{ij}^{test}. \quad (2.75)$$

Der Leonard-Spannungstensor L_{ij} gibt die Spannungen der kleinsten aufgelösten Strukturen wieder. Durch die Auswertung der Feinstrukturspannungen auf beiden Filterebenen mit Hilfe des Ansatzes von Smagorinsky ist es möglich die Germano Konstante C_g zu bestimmen:

$$\tau_{ij}^{sgs} - \tau_{kk}^{sgs} \approx 2C_g \Delta^2 |\tilde{S}| \left[\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right] = 2C_g m_{ij}^{sgs}, \quad (2.76)$$

$$\tau_{ij}^{test} - \tau_{kk}^{test} \approx 2C_g \hat{\Delta}^2 |\hat{S}| \left[\hat{S}_{ij} - \frac{1}{3} \hat{S}_{kk} \delta_{ij} \right] = 2C_g m_{ij}^{test}. \quad (2.77)$$

C_g ist hierin definiert als $C_g = C_s^2$. Setzt man die Definitionen (2.76), (2.77) in die Germano-Identität (2.75) ein und setzt voraus, dass beide Definitionen dieselbe Modellkonstante verwenden, gelangt man auf:

$$L_{ij} - \frac{1}{3} L_{kk} \delta_{ij} = 2C_g M_{ij} \quad \text{mit} \quad M_{ij} = (\widehat{m_{ij}^{sgs}} - m_{ij}^{test}). \quad (2.78)$$

Die Spur des Gleichungssystems (2.78) ist Null und somit ergeben sich zur Bestimmung des Germano-Parameters C_g , 5 unabhängige Gleichungen, die ohne zusätzliche Annahme schwer zu lösen sind. Germano [44] schlug eine Kontraktion mit dem Deformationsgeschwindigkeitstensors \tilde{S}_{ij} vor, die in ihrer physikalischen Bedeutung unklar ist und zu numerischen Instabilitäten bei der Berechnung von C_g führt [39]. In dieser Arbeit wurde

der Vorschlag von Lilly [77] verfolgt, der zur Bestimmung des Germano-Parameters C_g die Methode der kleinsten Fehlerquadrate auf das Gleichungssystem (2.78) anwendet, was einer indirekten Kontraktion mit \tilde{S}_{ij} entspricht:

$$Q =: \left(L_{ij} - \frac{1}{3} L_{kk} \delta_{ij} - 2C_g M_{ij} \right)^2 = \min. \quad (2.79)$$

Mit der Bestimmung des lokalen Minimums in der Definition (2.79) ergibt sich eine einfache Vorschrift zur Bestimmung des lokalen räumlichen und zeitlich veränderlichen Germano-Parameters C_g :

$$C_g = \frac{L_{ij} M_{ij}}{2M_{ij}^2}. \quad (2.80)$$

Dieser Parameter kann, wie auch bei der Variante von Germano [44], zu teilweise unerwünscht negativen Viskositäten führen, weshalb in dieser Arbeit eine Cut-Off-Stabilisierungsmethode angewendet wird und der Parameter bei einer Normierung zwischen Null und Eins keine negativen Werte annehmen kann. Kempf [58] zeigte in seiner Arbeit die Auswirkungen von negativen Viskositäten. Die Berechnung der turbulenten Viskosität erfolgt beim Germano-Modell über:

$$\nu_t = C_g \cdot \Delta |\tilde{S}|. \quad (2.81)$$

Besondere Vorteile bietet das Germano Modell, wenn die Ausdehnungen der diskretisierten Gitter in ihre Raumrichtungen stark variieren, wie es in komplexen Verbrennungssystemen und unstrukturierten Gitter oft der Fall ist.

Wale-Modell

Ein jüngeres Modell zur Bestimmung der turbulenten Viskosität, das besonders wandnahe Strömungen besser wieder gibt, wurde von Nicoud et al. [84] im Jahr 1999 veröffentlicht und ist als WALE-Modell (engl. *Wall-Adapting Local Eddy Viscosity Model*, kurz WALE) bekannt. Das Wale-Modell berechnet die turbulente Viskosität ν_t über einen Ansatz der den spurlosen, symmetrischen Teil des quadrierten Geschwindigkeitsgradiententensors $g_{ij} = \partial \tilde{u}_i / \partial x_j$ verwendet:

$$S_{ij}^d = \frac{1}{2} (g_{ij}^2 + g_{ji}^2) - \frac{1}{3} \delta_{ij} g_{kk}^2 \quad (2.82)$$

Die turbulente Viskosität wird über die Definition (2.83) berechnet:

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}}{(S_{ij} S_{ij})^{5/2} (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}} = (C_w \Delta)^2 \frac{OP_1}{OP_2}, \quad (2.83)$$

und besitzt im wandnahen Bereich die Fähigkeit die Viskositätswerte definitionsgemäß nicht zu überschätzen. Die Modellkonstante C_w lässt sich in Abhängigkeit der Smagorinsky-Konstante C_s über die Definition (2.84) berechnen:

$$C_w^2 = C_s^2 \frac{\sqrt{2} (S_{ij} S_{ij})^{3/2}}{S_{ij} S_{ij} OP_1 / OP_2}. \quad (2.84)$$

Kapitel 3

Grundlagen der Verbrennung

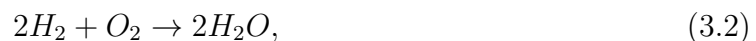
Die Verbrennung wird allgemein als exotherme sich selbst erhaltende Oxidation von Brennstoff mit einem Oxidator verstanden, bei deren Reaktion Wärme und Licht entstehen. Chemisch handelt es sich bei der Verbrennung um eine Redoxreaktion, bei der ein Reaktionspartner unter Elektronenabgabe (Oxidation) an einen zweiten Reaktionspartner (Reduktion) reduziert wird:



In diesem Kapitel soll ein grundlegendes Verständnis über die Mechanismen in Verbrennungsprozessen gegeben werden und wie diese Mechanismen in den Kontext der numerischen Verbrennungssimulation zur Anwendung kommen.

3.1 Reaktionskinetik und Reaktionsmechanismen

Zur Beschreibung von Verbrennungsprozessen ist es entscheidend die chemischen Umsatzraten der beteiligten Reaktionspartner bzw. Spezies α zu kennen. Die Reaktionskinetik stellt die Grundgleichungen bereit, mit denen sich der Umsatz von Reaktanden bei chemischen Reaktionen definieren lassen. Mit Hilfe der Reaktionskinetik lassen sich die zeitlichen Abläufe bei einer Reaktion bestimmen. Die grundlegenden Größen zur Beschreibung des zeitlichen Reaktionsablaufes sind hierbei durch die Reaktionsgeschwindigkeiten der beteiligten Spezies α definiert. Die Reaktionsgeschwindigkeit r gibt den Umsatz eines Stoffes pro Zeiteinheit und Volumen an. Stellt man sich eine Mischung aus Wasserstoff H_2 und Sauerstoff O_2 vor, die miteinander reagiert, so wird oft eine globale Reaktionsgleichung (3.2) angegeben:



welche die globalen Mengenverhältnisse, jedoch nicht den detaillierten Reaktionsablauf, angibt. Anhand der Definition (3.2) könnte man vermuten, dass beim Zusammentreffen von zwei Wasserstoffmolekülen H_2 mit einem Sauerstoffmolekül O_2 sofort Wasser H_2O entstehen würde. Diese Vermutung entspricht nicht der Realität. Zuerst ist für die gezeigte Knallgasreaktion (3.2) und für den Großteil an chemischen Reaktionen eine gewisse Aktivierungsenergie E_N notwendig, um die sogenannte Kettenstartreaktion auszulösen und die Umwandlung von Edukten zu Produkten zu starten. Zweitens werden alle chemischen Reaktionen nicht, wie die Globalreaktionsgleichung vermuten lässt, durch einen Reaktionsschritt, sondern durch teilweise hunderte Elementarreaktionen N vollzogen. Bei diesen Elementarreaktionen entstehen Zwischenspezies und Radikale, die berücksichtigt werden

müssen, wenn man die Reaktionsgeschwindigkeit und somit die Umsetzung von Edukten bestimmen möchte. Elementarreaktionen verlaufen stets in beide Reaktionsrichtungen ab. Die Gesamtheit aller Elementarreaktionen wird als Reaktionsmechanismus bezeichnet. Zur Beschreibung des Ablaufs einer Elementarreaktion wird im folgenden beispielsweise eine Zweistoffreaktion betrachtet, bei der die Edukte A und B zu den Produkten C und D reagieren:



Die stöchiometrischen Koeffizienten ν' für die Edukte und ν'' für die Produkte in Definition (3.3) geben die für die gezeigte Elementarreaktion benötigten Mengenverhältnisse an. Um die zeitliche Änderung der Edukte und Produkte in der Elementarreaktion angeben zu können, lassen sich die Reaktionsgeschwindigkeiten in beide Richtungen angeben. Die Basis zur Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeiten ist in der Stoßtheorie nach Trautz und Lewis begründet und besagt, dass die Reaktionsgeschwindigkeiten proportional der Stoßwahrscheinlichkeit der beteiligten Moleküle ist. Exemplarisch wird hier nur die eduktseitige Hinreaktion angegeben, die produktseitige Rückreaktion wird analog dazu bestimmt:

$$r_f = k_f c_A^{\nu'_A} c_B^{\nu'_B}. \quad (3.4)$$

In Definition (3.4) gibt c_α die Konzentration der beteiligten Spezies α an und k_f einen temperaturabhängigen Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten der über einen Ansatz von Arrhenius definiert ist:

$$k_f = A_N T^{\beta_N} \cdot e^{(-\frac{E_N}{RT})}. \quad (3.5)$$

Der stoßzahlabhängige präexponentielle Faktor A_N , der Exponent β_N und die Aktivierungsenergie E_N sind von dem jeweiligen Reaktionsmechanismus und der Elementarreaktion N abhängig. Die Gesamtreaktionsgeschwindigkeit von Spezies A und B zu den Spezies C und D ergibt sich aus der Summe der Hin- und Rückreaktion:

$$r = r_f - r_b. \quad (3.6)$$

In Definition (3.6) gibt r_b die Geschwindigkeit der Rückreaktion von Spezies C und D an, die unter bestimmten Voraussetzung eintritt. Dies ist z.B. der Fall, wenn die Aktivierungsenergie E_N , wie im Ansatz von Arrhenius (3.5) ersichtlich ist, ausreichend ist für eine Rekombinationsreaktion von Spezies C und D zu Spezies A und B. Die zeitliche Konzentrationsänderung der beteiligten Spezies kann mit Hilfe der Reaktionsgeschwindigkeit r berechnet werden:

$$-\frac{1}{\nu'_A} \frac{dc_A}{dt} = -\frac{1}{\nu'_B} \frac{dc_B}{dt} = \frac{1}{\nu''_C} \frac{dc_C}{dt} = \frac{1}{\nu''_D} \frac{dc_D}{dt} = r. \quad (3.7)$$

Betrachtet man die Elementarreaktion eines Brennstoffgemisches (wie z.B. Methan CH_4 oder Kerosin) mit den Spezies α und abhängig vom verwendeten Reaktionsmechanismus, N Elementarreaktionen, so gelangt man auf das Gesamtsystem:

$$\sum_{\alpha=1}^{\alpha_{max}} \nu'_{\alpha,m} M_\alpha \rightleftharpoons \sum_{\alpha=1}^{\alpha_{max}} \nu''_{\alpha,m} M_\alpha \quad \text{mit} \quad (m = 1, 2, \dots, N). \quad (3.8)$$

Die Reaktionsgeschwindigkeiten r_m für alle N Elementarreaktionen sind definiert über:

$$r_m = k_{f,m} \prod_{\alpha=1}^{\alpha_{max}} c_{\alpha}^{\nu'_{\alpha,m}} - k_{b,m} \prod_{\alpha=1}^{\alpha_{max}} c_{\alpha}^{\nu''_{\alpha,m}}. \quad (3.9)$$

Die Geschwindigkeitskoeffizienten für die Hin- und Rückreaktion $k_{f,m}$ und $k_{b,m}$ werden häufig als gleich angenommen und über eine Gleichgewichtskonstante $k_{eq,m}$ angegeben. Mit den berechneten Reaktionsgeschwindigkeiten r_m lassen sich die zeitliche Änderungen der Spezieskonzentrationen α definieren:

$$\frac{dc_{\alpha}}{dt} = \sum_{m=1}^N (\nu''_{\alpha,m} - \nu'_{\alpha,m}) \cdot r_m \quad \text{mit} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, \alpha_{max}) \quad (3.10)$$

Mit der Definition (3.10) der zeitlichen Konzentrationsänderung kann der chemische Quellterm in der Speziestransportgleichung (2.17) geschlossen werden:

$$\dot{\omega}_{\alpha} = M_{\alpha} \frac{dc_{\alpha}}{dt} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, \alpha_{max}). \quad (3.11)$$

Für die Berechnung eines detaillierten Reaktionsablaufes müssen für alle beteiligten Spezies α Transportgleichungen, deren Reaktionsgeschwindigkeiten und Quellterme berechnet werden. Mit steigendem Grad der Detaillierung des verwendeten Reaktionsmechanismus steigt der erforderliche Aufwand zur Berechnung. Die detaillierte Berechnung technisch relevanter Brennstoffe ist sehr rechenintensiv und somit teuer, weshalb häufig auf reduzierte Mechanismen zurückgegriffen wird. Reduzierte Mechanismen berücksichtigen weniger Spezies und Reaktionen und können somit bestimmte Nebenspezies (z.B. Schadstoffe, Radikale) nicht darstellen und sind nur für definierte Randbedingungen (Druck, Temperatur,...) gültig. Für den in dieser Arbeit verwendeten gasförmigen Brennstoffe Methan CH_4 , wurde der detaillierte GRI-3.0-Reaktionsmechanismus mit 325 Reaktionen und 53 Spezies verwendet [111]. Für die Berechnung der Wasserstoff/Stickstoff-Freistrahlf Flamme wurde ebenfalls der GRI-3.0-Reaktionsmechanismus mit 21 Reaktionen und 8 beteiligten Spezies verwendet. Neben dem GRI-3.0-Reaktionsmechanismen existieren weitere anwendungs- und brennstoffspezifische Reaktionsmechanismen.

3.2 Flammentypen

In der Verbrennungstechnik wird idealisiert zwischen zwei Flammentypen unterschieden. Hier steht auf der einen Seite die nicht-vorgemischte Verbrennung bzw. die Diffusionsflamme, bei der Brennstoff und Oxidator getrennt voneinander zur Reaktionszone transportiert werden und auf der anderen Seite die vorgemischte Verbrennung bzw. die Vormischflamme, bei der, wie es der Name schon vermuten lässt, Brennstoff und Oxidator auf molekularer Ebene vorgemischt zur Reaktionszone transportiert werden. Beispiele für Diffusionsflammen sind die Strahlflamme oder eine normale Kerze. Ein bekannter Vertreter laminarer Vormischflammen ist der Bunsenbrenner.

Diffusionsflammen

Bei Diffusionsflammen werden, wie schon erwähnt, Brennstoff und Oxidator getrennt zur Reaktionszone transportiert. Ohne einen geeigneten Oxidator kann keine Verbrennung von Brennstoff stattfinden. In nahezu allen technischen Verbrennungssystemen kommt Luft, beziehungsweise der in der Luft enthaltene Sauerstoff O_2 , als Oxidator zur Anwendung, weshalb im weiteren Verlauf von einem Brennstoff-Luft-Gemisch ausgegangen wird. Alle Brennstoff-Luft Gemische reagieren nur innerhalb eines Bereiches begrenzter Mischungsverhältnisse. Die Begrenzungen des brennbaren Bereiches stellen die Zündgrenzen (Untere und Obere Zündgrenze) dar. Diese Zündgrenzen hängen vornehmlich von der Art des Brennstoffs, vom Druck, der Temperatur sowie von der Geometrie des Brennraums ab. Werden Brennstoff und Luft getrennt in einen Brennraum eingegeben, muss vor der eigentlichen Verbrennung ein brennbares Brennstoff-Luft Gemisch vorliegen. Dieses brennbare Gemisch kann bei nicht-vorgemischter Verbrennung bzw. Diffusionsflammen nur durch die molekulare Mischung der beiden Reaktionspartner mit Hilfe von konvektiven und diffusiven Transportvorgänge bereitgestellt werden. Aus diesem Zusammenhang resultiert der Name Diffusionsflamme. Der allgemeine chemische Umsatz hängt bei der nicht-vorgemischten Verbrennung im wesentlichen von der Durchmischung von Brennstoff und Luft ab und wird durch turbulente Strömungsbewegungen stark erhöht. Sobald ein brennbares Brennstoff-Luft Gemisch vorliegt reagiert die Mischung und es kommt zur Verbrennung [56]. Zur Charakterisierung des Brennstoff-Luft Gemisches wird häufig das dimensionslose Verbrennungsluftverhältnis λ_L angegeben:

$$\lambda_L = \frac{m_L}{m_{L, \text{st\"ochio.}}}, \quad (3.12)$$

das die Massenverhältnisse zwischen der tatsächlich vorliegenden Luftmasse m_L und der für eine stöchiometrische Verbrennung benötigte Luftmasse $m_{L, \text{st\"ochio.}}$ angibt. Neben dem Verbrennungsluftverhältnis wird häufig das vorliegende Äquivalenzverhältnis Φ angegeben, welches das inverse Verbrennungsluftverhältnis darstellt.

In Verbrennungssimulationen wird das Brennstoff-Luft Gemisch oft über den Mischungsbruch bzw. Mischungsgrad Z angegeben. Der Mischungsbruch Z ist zwischen 0 (reiner Oxidator) und 1 (reiner Brennstoff) definiert und charakterisiert die Mischung zwischen Brennstoff und Luft. Für die in Abbildung 3.1 schematisch gezeigte Wasserstoff-diffusionsflamme liegt der brennbare Mischungsbruchbereich zwischen $Z = 0.03 - 0.59$ (rot eingefärbt). Im unteren Bereich liegt eine unterstöchiometrische, im oberen Bereich eine überstöchiometrische Mischung vor, die in der Mitte (durchgezogene senkrechte Linie) durch den stöchiometrischen Mischungsbruch $Z_{st} = 0.31$ getrennt sind. Eine unterstöchiometrisch (magere) Mischung wird durch einen Überschuss an Oxidator gekennzeichnet, während im überstöchiometrischen (fetten) Bereich ein Überangebot an Brennstoff vorliegt. Die stöchiometrische Mischung kennzeichnet den Punkt, in dem ein optimales Brennstoff-Luft Gemisch vorliegt und eine vollständige Verbrennung von Brennstoff und Luft stattfindet. In Diffusionsflammen wird stets der gesamte brennbare Bereich durchlaufen. Dieser beinhaltet den Punkt der stöchiometrischen Verbrennung, an dem die Flammentemperatur ihr Maximum erreicht. Aufgrund des in der Verbrennungsluft enthaltenen oder im Brennstoff gebundenen Stickstoff N_2 wird an dieser Stelle eine erhöhte Bildung von unerwünschten Stickoxiden NO_x stattfinden, da die Bildung von Stickoxiden NO_x , zu-

mindest von thermisch gebildeten NO_x , eine starke Temperaturabhängigkeit aufweist. Diese erhöhte Stickoxidbildung kennzeichnet einen Nachteil in der nicht-vorgemischten Verbrennung. Durch den definierten brennbaren Bereich wird eine Flammenbewegung nur in sehr begrenztem Maße ermöglicht und eine Flammenausbreitungsgeschwindigkeit wie bei vorgemischter Verbrennung existiert bei nicht-vorgemischter Verbrennung nicht. Dieser Zustand kennzeichnet einen Vorteil der nicht-vorgemischten Verbrennung, weil hierdurch die Stabilität der Verbrennung unterstützt wird und z.B. ein Rückschlagen der Flamme verhindert wird, wie es bei nicht-vorgemischter Verbrennung aufgrund der teilweise stark variierenden Flammengeschwindigkeiten auftreten kann. Dieser Vor-

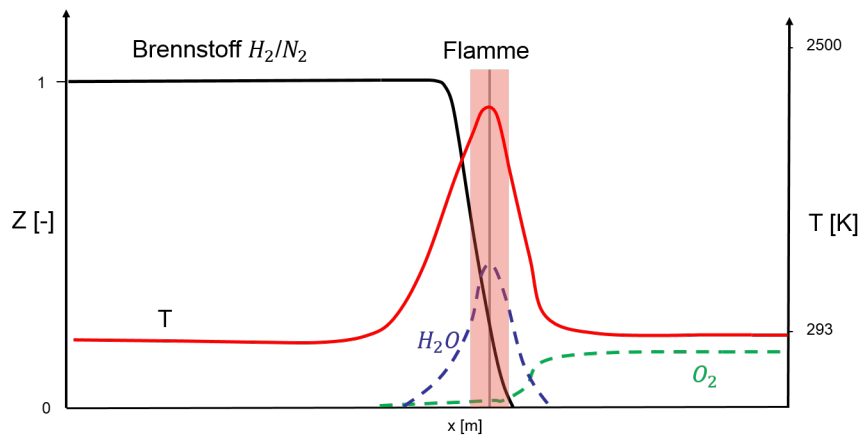


Abbildung 3.1: Schematische Struktur einer Diffusionsflamme

teil wird in Flugtriebwerksbrennkammer zur Stabilisierung der Verbrennung eingesetzt. Die Reduzierung der Schadstoffemissionen, speziell der Stickoxide NO_x , wird hierbei in einem begrenzten Rahmen durch eine gestufte Verbrennung erreicht. In der sogenannten RQL-Brennkammer (engl. *Rich burn, Quick quench, Lean burn Combustion*, kurz RQL) wird eine fett-mager-Stufung vorgenommen. Die RQL-Brennkammer besteht prinzipiell aus zwei getrennten Verbrennungszonen. In der ersten Zone wird eine überstöchiometrische Verbrennung in einem Bereich mit niedrigen thermischen NO_x -Bildungsraten vorgenommen. In der zweiten unterstöchiometrischen Verbrennungszone wird die vollständige Verbrennung bei Überschuss an Sauerstoff abgeschlossen. Der Übergang zwischen den beiden Verbrennungszonen muss optimalerweise sprunghaft erfolgen, damit keine Bereiche mit stöchiometrischen Verbrennungsbedingungen entstehen können, welche durch eine sehr hohe Verbrennungstemperatur mit einer starken thermischen NO_x -Schadstoffbildung gekennzeichnet sind [10]. Durch eine variable Brennstoffzufuhr über mehrere regelbare Brennerköpfe je Stufe, gekoppelt mit einer variablen Luftführung können durch die Verringerung von Temperaturspitzen niedrige Stickoxidwerte erreicht werden. Durch die gestufte Verbrennung wird der Regelbereich, in dem die Verbrennung stattfindet, in Regionen mit geringerem Schadstoffbildungspotential verschoben. Wie oben angesprochen ist die nicht-vorgemischte Verbrennung durch die Notwendigkeit der Durchmischung des Brennstoff-Luft Gemisches charakterisiert. Die chemischen Prozesse nach der erfolgten Mischung eines brennbaren Gemisches werden als sehr schnell angenommen im Vergleich zum Mischungsprozess. Eine charakteristische Größe, welche die chemische Zeit zur strö-

mungsabhängigen Mischungszeit in Verhältnis setzt, ist die Damköhlerzahl Da :

$$Da = \frac{\tau_{mix}}{\tau_{ch}}. \quad (3.13)$$

Die Damköhlerzahl Da ist für Diffusionsflammen sehr hoch, was aus den kurzen chemischen Zeitskalen im Vergleich zu den Mischungszeiten resultiert. Viele Modellierungsansätze zur Beschreibung der nicht-vorgemischten Verbrennung basieren auf der Annahme hoher Damköhlerzahlen (*gemischt = verbrannt*). Hierbei gibt der Stofftransport die geschwindigkeitsbestimmende Größe an, weil die Zeitskalen der Reaktion einige Größenordnungen kleiner sind.

Der Einsatz der nicht-vorgemischten Verbrennung wird durch zukünftige Schadstoffregulierungen zunehmend schwieriger. Das Potenzial der Schadstoffreduzierung ist im Kontext der nicht-vorgemischten Verbrennung ohne zusätzliche Sekundärmaßnahmen weitestgehend ausgeschöpft. Aus diesem Grund werden zukünftig verstärkt Konzepte verfolgt, die auf einer Vermeidung des stöchiometrischen Verbrennungszustandes basieren. Im Zuge der schadstoffarmen Verbrennung wird häufig mit Vormischflammen gearbeitet.

Vormischflammen

Der zweite idealisierte Flammentyp ist durch die Vormischflamme bzw. die sogenannte vorgemischte Verbrennung charakterisiert. Bei der vorgemischten Verbrennung wird das Brennstoff-Luft Gemisch molekular gemischt zur Reaktionszone transportiert. Durch das auf molekularer Ebene vorgemischte Brennstoff-Luft Gemisch gewinnt die Vormischflamme die Eigenschaft sich mit einer charakterisierenden Geschwindigkeit bewegen zu können. Diese Geschwindigkeit ist bei laminaren Vormischflammen als laminare Flammengeschwindigkeit s_l bekannt und gibt eine Propagationgeschwindigkeit der sich ausbildenden Flammenfront in Richtung des unverbrannten Brennstoff-Luft Gemisches an. Die laminare Flammengeschwindigkeit ist von der Mischung, den Brennstoffeigenschaften und dem thermodynamischen Zustand des Gemisches abhängig und nicht zu verwechseln mit der turbulenten Flammengeschwindigkeit s_t , die als modellabhängige Ersatzgröße bei der Beschreibung von turbulenten Vormischflammen zur Anwendung kommt und zusätzlich vom Strömungszustand und -struktur abhängt. Turbulente Vormischflammen werden bevorzugt eingesetzt, wenn eine intensive Verbrennung aufgrund von begrenzten Volumenverhältnissen erzielt werden soll, wie z.B. in Otto-Motoren. Die Vorteile der vorgemischten Verbrennung sind die nahezu rußfreie und schadstoffarme Verbrennung, weil eine definierte Gemischzusammensetzung vorgegeben werden kann und somit die Stöchiometrie festgelegt ist. Die schadstoffarme Verbrennung ist ein Grund, warum die (magere) Vormischverbrennung seit geraumer Zeit in stationären Gasturbinen eingesetzt wird. Einen Nachteil bzw. eine Herausforderung, die die Vormischverbrennung mit sich bringt, sind die erhöhten Sicherheitsanforderungen, damit das vorgemischte, explosionsfähige Brennstoff-Luft Gemisch nur in dem vorher definierten Bereich kontrolliert verbrennt. Dies ist ein Grund, warum die Vormischverbrennung noch nicht in instationär betriebenen Fluggasturbinen eingesetzt wird.

Die Struktur einer stöchiometrischen, laminaren, freibewegenden Vormischflamme lässt sich, wie in Abbildung 3.2 gezeigt, grob in drei Bereiche gliedern.

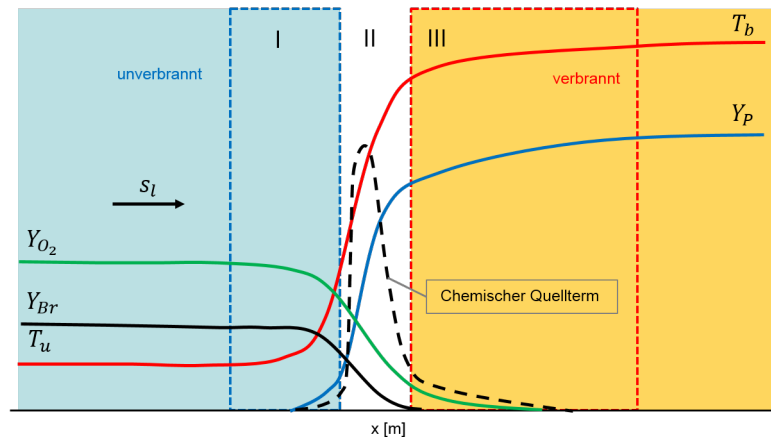


Abbildung 3.2: Schematische Struktur einer laminaren, stöchiometrischen Vormischflamme

In Abbildung 3.2 bedeutet blau eingefärbt das Vorliegen eines unverbrannten Brennstoff-Luft Gemisches, während der gelb eingefärbte Bereich das Abgas repräsentiert. Der erste (I) Bereich, bläulich eingefärbt mit blau gestrichelten Rahmen, ist die Vorwärmzone, die im unverbrannten Gas kurz vor dem zweiten Bereich, der eigentlichen Reaktionszone liegt. Wie der Name schon vermuten lässt, findet in der Vorwärmzone eine Temperaturerhöhung des Frischgases statt. Verbrennungsprodukte aus der Reaktionszone diffundieren in die Vorwärmzone und umgekehrt Verbrennungsedukte in die Reaktionszone. Hierdurch wird die Bewegung der Flammenfront bei Vormischflammen begründet. Im zweiten (II), weiß dargestellten Bereich, der Reaktionszone, findet die eigentliche exotherme Reaktion statt und die Wärmefreisetzung erreicht ihr Maximum. In der Reaktionszone treten infolge der Reaktion starke Gradienten in den thermodynamischen und chemischen Variablen auf, was bei der Simulation der vorgemischten Verbrennung einer besonderen Betrachtung bedarf. Auf die Reaktionszone folgt der dritte (III) Bereich, gelb gefärbt mit rot gestrichelten Rahmen, die Oxidationszone oder auch Gleichgewichtszone, in der die langsamen Oxidationsreaktionen stattfinden, bis der Gleichgewichtszustand erreicht ist. Die Reaktionszone ist von der räumlichen Abmessung ein Vielfaches kleiner als die Vorwärm- und Oxidationszone. Die räumlichen Abmessungen und Reaktionsabläufe in der Reaktionszone variieren mit den stöchiometrischen Bedingungen. Bei turbulenten Vormischflammen bleibt die vorgestellte grobe Struktur der Flamme in drei Bereiche unverändert. Starke Änderungen werden in der Reaktionszone beobachtet. Im Vergleich zur laminaren ebenen Flammenfront wird diese bei turbulenten Strömungsbedingungen durch die vorherrschenden Wirbelstrukturen mehr oder weniger, abhängig vom Turbulenzgrad, verwinkelt. Man spricht hier von einer Interaktion der Turbulenz mit der Flamme, was in Abbildung 3.3 verdeutlicht wird. Infolge der turbulenten Verwinklung der Flammenfront steigt deren Fläche an, woraus ein erhöhter Umsatz von Brennstoff resultiert. Die turbulente Flammengeschwindigkeit s_t ist deutlich höher als die laminare s_l , was sich in einem erhöhten Brennstoffumsatz widerspiegelt.

Teilweise vorgemischte Verbrennung

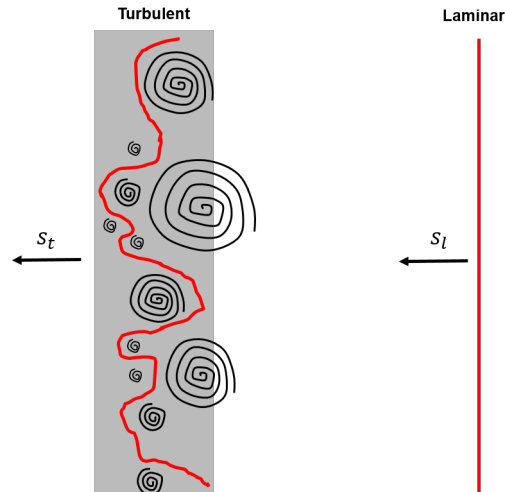


Abbildung 3.3: Vergleich einer turbulenten (links) und laminaren (rechts) Vormischflamme

Die beiden vorgestellten idealisierten Flammentypen treten in der Realität oft in einer kombinierten Form auf. So wird beispielsweise bei der beschriebenen RQL-Verbrennung in Flugtriebwerksbrennkammern eine Kombination aus nicht-vorgemischter und vorgemischter Verbrennung genutzt, um zum einen eine stabile und zum anderen eine schadstoffreduzierte Verbrennung zu gewährleisten. Für die numerische Behandlung solcher Verbrennungszustände sind spezielle Konzepte entwickelt worden, die jedoch in dieser Arbeit nicht weiter vorgestellt werden.

3.3 Verbrennungsmodellierung

Bei der Berechnung von Verbrennungssystemen wird man ähnlich wie in der Turbulenzmodellierung vor die Herausforderung gestellt, dass die typischen Zeitskalen der Elementarreaktionen in einem chemischen Prozess, wie in Abbildung 3.4 dargestellt, einen weiten zeitlichen Bereich umfassen.

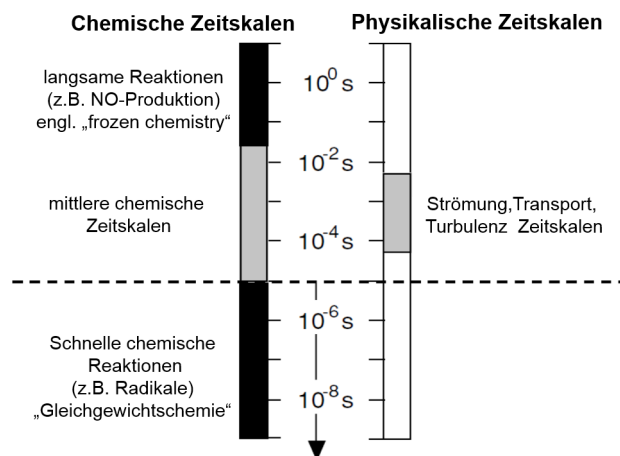


Abbildung 3.4: Zeitskalenvergleich Strömung ↔ Chemie [123]

Die Dichte, die Viskosität und der Druck sind über die Stoffzusammensetzung und die Temperatur direkt an den chemischen Prozess gekoppelt. Zusätzlich erfolgt durch die chemische Umsetzung mit ihrer einhergehenden starken Wärmefreisetzung und der hieraus resultierenden Änderung der Stoffzusammensetzung sowie der Temperatur eine starke Beeinflussung des Strömungsfeldes. Der chemische Umsatz ist wiederum von dem strömungskontrollierten Stofftransport abhängig. Hieraus ergibt sich, wie in Abbildung 3.5 verdeutlicht, eine starke Wechselwirkung zwischen dem Strömungsfeld und der Chemie.

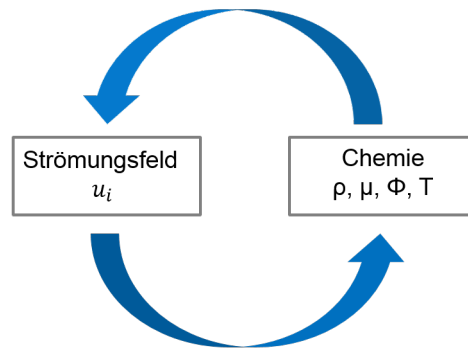


Abbildung 3.5: Wechselwirkung Strömung ↔ Chemie

Für die numerische Simulation von Verbrennungssystemen ist es erforderlich, die chemischen Prozesse und die hieraus resultierende Wechselwirkung mit dem Strömungsfeld über eine geeignete Modellierung der Verbrennung abzubilden. Wie in Kapitel 3.1 angesprochen, hängt der Aufwand und die Güte der Ergebnisse einer Verbrennungssimulation neben der Turbulenzmodellierung in hohem Maße von dem Grad der Detaillierung der chemischen Modellierung ab. Die Modelle zur Abbildung der chemischen Vorgänge in Verbrennungssimulationen lassen sich grob nach dem Grad der Detaillierung über dem benötigten Aufwand, wie in Abbildung 3.6 gezeigt, in drei Gruppen unterteilen.

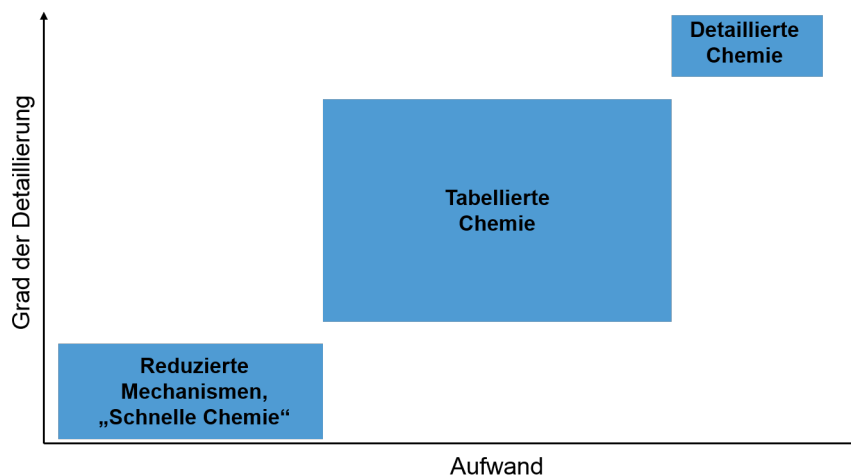


Abbildung 3.6: Drei Gruppen der Verbrennungsmodellierung

Das genaueste Abbild der chemischen Prozesse wird ähnlich der DNS im Kontext der Turbulenz über eine Simulation mittels detaillierter Chemie erzielt. Hierbei muss für jede beteiligte Spezies und Zwischenspezies eine Transportgleichung inklusive Quellterm und die Elementarreaktionen zu jedem berechneten Zeitschritt berücksichtigt werden. Als Beispiel kann hier der GRI-3.0 Mechanismus [111] für Methan CH_4 bei Umgebungsbedingungen mit seinen 53 beteiligten Spezies und 325 Elementarreaktionen angeführt werden. Es ergibt sich ein über die Quellterme der Speziestransportgleichung stark gekoppeltes und hierdurch numerisch steifes Gleichungssystem, welches aufgrund der sehr kleinen Zeitskalen der chemischen Prozesse in sehr kleinen Zeitschrittweiten numerisch gelöst werden muss. Trotz einer sehr hohen Ergebnisgüte ist der Aufwand bei einer Verbrennungssimulation mit detaillierter Chemie extrem hoch und dadurch mit den heutigen Rechenkapazitäten nur in sehr begrenztem Maße durchführbar. Auf der anderen Seite können sehr einfache reduzierte Reaktionsmechanismen mit überschaubarem numerischen Aufwand zur Lösung von Verbrennungssystemen zur Anwendung kommen. Ein sehr einfaches Modell zur Berechnung von Diffusionsflammen basiert auf der Annahme der unendlich schnellen Chemie ($Da = \infty$) und stellt eine lineare Beziehung zwischen dem Mischungsgrad Z und den abhängigen Größen des Verbrennungssystems bereit. Das Burke-Schumann-Modell ist auch als Flammenflächenmodell bekannt und betrachtet nur eine irreversible Einschrittreaktion (Brutto-Reaktionsgleichung). Eine wesentliche Annahme von Burke und Schumann war, dass die Verbrennung nur bei stöchiometrischer Mischung auf einer singulären Fläche (Flammenfläche) stattfinden kann und somit im Mischungsgradraum keine Koexistenz von Brennstoff und Oxidator bestehen kann. Der Mischungsgrad Z dient als Kontrollparameter für die chemische Umsetzung und führt zu der Annahme "gemischt gleich verbrannt", sobald auf molekularer Ebene die stöchiometrische Mischung erreicht wird. Eine Erweiterung des Burke-Schumann Modells arbeitet mit der Annahme, dass das System über reversible Reaktionen sofort im chemischen Gleichgewicht ist. Eine Koexistenz von Brennstoff und Oxidator ist in der Nähe des stöchiometrischen Punktes möglich und es besteht im begrenzten Rahmen die Möglichkeit, Nebenspezies über einen funktionalen Zusammenhang des vorliegenden Mischungsgrades abzuleiten.

Die dritte Gruppe liegt vom Aufwand und dem Grad der Detaillierung bei der Abbildung der chemischen Prozesse zwischen den beiden eben beschriebenen Ansätzen. Der Ansatz der tabellierten Chemie basiert darauf, dass die chemischen Zustände eines Gemisches in Abhängigkeit des Mischungsgrades Z und optional, zusätzlicher Variablen über funktionale Zusammenhänge tabelliert werden und sich somit zur Lösung des Problems die Anzahl der zu lösenden Gleichungen im Vergleich zur detaillierten Chemie deutlich reduzieren. Die Idee hierzu stammt von Williams [124] aus dem Jahr 1975 und ist als *Flamelet*-Konzept (engl. *Flamelet* = *kleine Flamme*, *Flämmchen*) bekannt. Beim Flamelet-Konzept wird eine turbulente dreidimensionale Diffusionsflamme durch ein Ensemble von laminaren eindimensionalen Flamelets repräsentiert. Die chemischen und thermodynamischen Zustände werden in Abhängigkeit des Mischungsgrades und der skalaren Dissipationsrate χ , die ein inverses Maß für die Mischungszeit und somit eine Abweichung vom chemischen Gleichgewicht darstellt, in einer externen Tabelle gespeichert und während der Simulation ausgelesen. Dieses Modell, auch unter dem Namen *Steady-Flamelet-Modell* bekannt, basiert ebenfalls auf der Annahme der schnellen Chemie und kann deshalb Effekte endlich schneller Chemie, wie sie in technisch relevanten Verbrennungssystemen auftreten, nicht

wiedergeben.

In dieser Arbeit wurden alle Konfigurationen mit einem Ansatz aus der Gruppe der tabellierten Chemie gerechnet, der eine optimierte Methodik verwendet, um die Effekte endlich schneller Chemie zu berücksichtigen. Auf diesen Ansatz, der als FGM-Modell (engl. *Flamelet Generated Manifold* kurz FGM) bekannt ist, wird im folgenden Abschnitt näher eingegangen.

3.3.1 Flamelet Generated Manifold (FGM)

Dieses Konzept wurde zeitgleich unter dem Namen FGM von van Oijen und de Goey [85] und unter dem Namen FPI (engl. *Flame Prolongation of Intrinsic low-dimensional manifolds*, kurz FPI) von Gicquel et al. [45] publiziert. Das FGM-Modell basiert auf dem vorher erwähnten Flamelet-Konzept und ist für die Effekte endlich schneller Chemie um eine weitere den Reaktionsfortschritt repräsentierende Variable erweitert worden. Aufgrund der Parametrisierung der chemischen und thermodynamischen Zustandsgrößen von eindimensionalen Flammen über zwei den Reaktionsfortschritt beschreibende Variablen wird eine deutliche Reduktion der benötigten Rechenkapazität erreicht. Ein entscheidender Unterschied zu dem vorher beschriebenen Steady-Flamelet-Modell ist, dass die Flamelets beim FGM-Modell auf der Basis von vorgemischten eindimensionalen Flammen erstellt werden. Der Mischungsgrad Z ist lokal nun ein konstanter Parameter und die Flamelets basieren auf dem zugrundeliegenden chemischen Reaktionsfortschritt, der über die zusätzlich eingeführte Reaktionsfortschrittsvariable C definiert wird. Hierdurch können alle chemischen und thermodynamischen Größen für einen definierten Mischungsgrad räumlich aufgelöst werden und somit Effekte endlich schneller Chemie in die Berechnung einfließen. Vorteilhaft ist, dass zur Erstellung der Chemietabellen detaillierte Reaktionsmechanismen verwendet werden und hierdurch die Abbildung von Nebenspezies wie auch Schadstoffen möglich ist.

3.3.1.1 Mischungsgradgleichung

Wie schon bei den Steady-Flamelet Modellen erwähnt, repräsentiert der Mischungsgrad den lokalen räumlichen Mischungszustand und gibt die Verhältnisse der Elementmassenbrüche $m_{e,\alpha}$ der vorherrschenden Spezies α an:

$$Z_e = \sum_{\alpha=1}^{\alpha_{max}} m_{e,\alpha} Y_{\alpha} \quad (e = 1, 2, \dots, N_e) \quad (3.14)$$

Für die Beschreibung des lokalen Mischungszustandes und deren zeitliche Änderung in Verbindung der lokalen Transporteigenschaften wurde von Shvab [107] und Zeldovich [127] auf Basis der Speziestransport- (2.11) - und der Enthalpiegleichung (2.21) unter vereinfachenden Annahmen eine Transportgleichung für den Mischungsgrad Z aufgestellt. Die Annahmen des Shvab-Zeldovich Formalismus zur Herleitung der Mischungsgradgleichung sind:

- Vernachlässigung von thermischer Strahlung,
- keine Arbeit am Fluid durch Druckänderungen $\frac{Dp}{Dt} = 0$,

- Reibungsfreiheit,
- Vernachlässigung von Soret und Dufour Diffusionseffekten,
- Gleiche Diffusionskoeffizienten für alle Spezies $D_\alpha = D$,
- Gleiche Diffusionskoeffizienten für die Enthalpie \rightarrow Lewis-Zahl $Le = 1$,
- keine Temperaturerhöhung durch Dissipation von turbulenter kinetischer Energie.

Mit den genannten Vereinfachungen lassen sich beide Gleichungen in die gleiche Struktur bringen und in eine quelltermfreie Transportgleichung für den Mischungsgrad Z überführen:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z_e) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Z_e u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Z_e}{\partial x_j} \right). \quad (3.15)$$

Die Definition (3.15) enthält keinen Quellterm, weil der Mischungsgrad Z auf Elementmassenbrüchen basiert. In technischen Verbrennungssystemen werden meist nur Brennstoff (Br) - und Oxidatorstoffströme (Ox) eingeführt, weshalb es sinnvoll ist die Elementkonzentrationen durch eine Transformation mit den ungemischten Stoffen zu normieren, so dass für den Mischungsgrad Z nach Definition (3.16) in reinem Brennstoff der Wert 1 und in reinem Oxidator den Wert 0 gilt:

$$Z = \frac{Z_e - Z_{e,Br}}{Z_{e,Br} - Z_{e,Ox}} \quad (e = 1, 2, \dots, N_e) \quad (3.16)$$

Im Rahmen der dichte-gewichteten und gefilterten LES wird der sich ergebenden Feinstrukturanteil τ_Z^{sgs} analog zu der Definition (2.68) über einen Gradientenflussansatz beschrieben:

$$\tau_Z^{sgs} = -\frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \quad \text{mit} \quad Sc_t = Sc = 0.7. \quad (3.17)$$

Setzt man die Definition (3.17) in die gefilterte Mischungsgradgleichung ein, erhält man eine in der Verbrennungssimulation gebräuchliche Gleichung, welche die lokalen Mischungszustände im Kontext der reaktiven LES wiedergeben kann:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{Z}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{Z} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{(\bar{\mu} + \mu_t)}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right). \quad (3.18)$$

3.3.1.2 Reaktionsfortschrittsvariable

Die Reaktionsfortschrittsvariable C stellt den Unterschied zu den Steady-Flamelet Modellen dar. Über den bekannten Reaktionsfortschritt bei lokal festgehaltenem Mischungsgrad Z kann im Vergleich zu den rein Mischungsgrad basierenden Modellen, die auf der Grundlage der schnellen chemischen Umsetzung basieren, eine endlich schnelle chemische und räumlich definierte Umsetzung eingeschlossen der Produktion von Zwischenspezies und den hieraus resultierenden Schadstoffen dargestellt werden. Die Reaktionsfortschrittsvariable C repräsentiert typischerweise einen gewichteten Speziesmassenbruch:

$$C = \sum_{\alpha=1}^{\alpha_{max}} a_\alpha Y_\alpha \quad (3.19)$$

Die Reaktionsfortschrittsvariable C kann prinzipiell frei aus denen in der vorliegenden Mischung enthaltenen Spezies gewählt werden. Sie muss lediglich einen monotonen Verlauf vom unverbrannten bis zum verbrannten Zustand über alle Mischungszustände wiedergeben können und kann auch aus einer Linearkombination von mehreren Spezies gebildet werden. Bei der Verbrennung von Brennstoffen auf Kohlenwasserstoffbasis C_xH_y bietet sich im einfachsten Fall Kohlendioxid CO_2 als Reaktionsfortschrittsvariable C an:

$$C = Y_{CO_2}. \quad (3.20)$$

Ein Vorteil bei der Verwendung von CO_2 als Reaktionsfortschrittsvariable ist die breite Quelltermverteilung, weshalb keine hohe räumliche Auflösung der Flamme benötigt wird. Jedoch findet beispielsweise nach überstöchiometrischen, vorgemischten Flammen bei hohen Temperaturen eine Rekombination von Kohlendioxid CO_2 zu Kohlenmonoxid CO statt, weshalb hier eine Erweiterung der Reaktionsfortschrittsvariablen C nützlich sein kann, um Fehler bei der Berechnung der Verbrennung zu minimieren [34, 35]:

$$C = Y_{CO_2} + Y_{CO}. \quad (3.21)$$

Bei der Verbrennung von Gemischen auf Wasserstoffbasis H_2 , wie bei der später gezeigten H3-Flamme, kommt nur eine Reaktionsfortschrittsvariable C auf Grundlage von Wasser H_2O in Frage, weil kein Kohlendioxid CO_2 bzw. Kohlenmonoxid CO gebildet werden kann, da das Element Kohlenstoff C nicht im Gemisch enthalten ist:

$$C = Y_{H_2O}. \quad (3.22)$$

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Reaktionsfortschrittsvariablen nach Definitionen (3.21) für die Verbrennung von Methan CH_4 sowie für die Verbrennung von Wasserstoff nach der Definition (3.22) verwendet. In Analogie zum Mischungsgrad wird die Reaktionsfortschrittsvariable über eine Transportgleichung berechnet:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{C}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{C}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{(\bar{\mu} + \mu_t)}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_j} \right) + \tilde{S}_C. \quad (3.23)$$

In Definition (3.23) gibt S_C einen Quellterm an, der aus der Chemietabelle entnommen wird.

3.3.1.3 Chemietabelle

Für die Berechnung eines Verbrennungssystems mit all seinen chemischen und thermodynamischen Zuständen muss vor der Simulation in einem Preprocessing-Schritt eine geeignete Chemietabelle erzeugt werden. Zur Generierung der Chemietabelle mit CHEM1D [20] werden in einem ersten Schritt über den brennbaren Mischungsgradbereich äquidistant verteilte Flamelets mit ihren Reaktionsfortschrittsvariablen und den zugehörigen chemischen und thermodynamischen Variablen berechnet und in der Chemietabelle gespeichert. Hierdurch ergibt sich eine Abhängigkeit aller Größen Φ vom Mischungsgrad Z und der Reaktionsfortschrittsvariablen C :

$$\Phi = f(Z, C) \quad (3.24)$$

CHEM1D kann nur Flamelets im brennbaren Mischungsgradbereich erzeugen, weshalb im nicht brennbaren Bereich eine lineare Extrapolation der Daten auf Basis reiner Mischung vorgenommen wird [60, 61], um für die Berechnung Daten im nicht brennbaren Bereich bereitzustellen. Die Temperatur wird über die vorliegende Dichte der Mischung, die molare Masse, den Druck und der spezifischen Gaskonstante mit Hilfe der idealen Gasgleichung (2.29) bestimmt.

3.3.1.4 Chemie-Turbulenz-Interaktion (Presumed PDF)

Analog zu den generellen strömungsmechanischen Erhaltungsgleichungen aus Kapitel 2 werden die Mischungsgrad-(3.18) und die Reaktionsfortschrittsvariablengleichung (3.23) im Rahmen der Grobstruktursimulation ebenfalls einer räumlichen Filterung unterzogen. Es ergeben sich Feinstrukturanteile, die modelliert werden müssen. Zwischen den abhängigen tabellierten Größen Φ und den beiden Tabellenparametern (Z, C) besteht ein nichtlinearer Zusammenhang, weshalb von den gefilterten Werten der Tabellenparameter (\tilde{Z}, \tilde{C}) nicht auf die abhängigen tabellierten Größen Φ zurückgeschlossen werden kann.

$$\widetilde{\Phi(Z, C)} \neq \Phi(\tilde{Z}, \tilde{C}) \quad (3.25)$$

Zur Schließung des Problems wird in dieser Arbeit ein Ansatz gewählt, der als presumed-PDF (engl. *Probability Density Function*, kurz PDF) Ansatz bekannt ist und bei dem die statistische Verteilung der abhängigen Variablen durch eine vorab angenommene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion abgebildet wird [126]. Um die gefilterten tabellierten Werte $\tilde{\Phi}$ zu bestimmen, müsste eine gefilterte Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\tilde{\mathcal{P}}(Z, C)$ angenommen werden:

$$\tilde{\Phi} = \int \int \Phi(Z, C) \tilde{\mathcal{P}}(Z, C) dZ dC. \quad (3.26)$$

In der vorliegenden Arbeit wird eine mit dem Gleichgewichtswert normierte Reaktionsfortschrittsvariable C verwendet:

$$C = \frac{Y_C - (Y_C)_{min}}{(Y_C)_{max} - (Y_C)_{min}} \quad (3.27)$$

Die Definition (3.27) minimiert die statistische Abhängigkeit der beiden Tabellenparameter und bestärkt somit die Gültigkeit der vereinfachenden Annahme der statistischen Unabhängigkeit der Tabellenparameter Z, C [70]. Mit der Annahme der statistischen Unabhängigkeit der Tabellenparameter kann zur Berechnung der gefilterten tabellierten Werte eine Kombination aus zwei getrennten vorab wählbaren Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen angenommen werden [53]:

$$\tilde{\Phi} = \int \int \Phi(Z, C) \tilde{\mathcal{P}}(Z) \tilde{\mathcal{P}}(C) dZ dC. \quad (3.28)$$

Durch die vereinfachende Definition (3.28) besteht die Möglichkeit die Integration vor der Simulation innerhalb der Tabelle durchzuführen. Hierdurch wird eine deutliche Rechenzeitersparnis erzielt. Alternativ müsste eine Transportgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion gelöst werden.

Für die Abbildung des Mischungsgrades bietet sich die β -PDF als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion an [54, 92, 69]. Die β -PDF kann eine Vielzahl von Formen wiedergeben

und ist eine Funktion des Mischungsgrades Z als Integrationsvariable des gefilterten Wertes des Mischungsgrades \tilde{Z} sowie der Feinstrukturvarianz des Mischungsgrades $\widetilde{Z''^2}$. Nach [69] wird für die Verteilung der Reaktionsfortschrittsvariablen anstelle einer β -PDF eine δ -PDF Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion vorgeschlagen, was in der vorliegenden Arbeit berücksichtigt wurde. Mit den genannten Vereinfachungen und den gewählten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen kommt man zu einer Gleichung (3.29), die für jeden Punkt und für die angegebene Varianzschriftweite mehrmals auf die Chemietabelle angewendet wird, um eine Abhängigkeit zwischen den tabellierten Werten herzustellen:

$$\tilde{\Phi} = \int \int \Phi(Z, C) \tilde{\mathcal{P}}_\beta(\tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}) \tilde{\mathcal{P}}_\delta(\tilde{C}) dZ dC. \quad (3.29)$$

Zusammenfassend müssen für die Abbildung der chemischen Umsetzung in turbulenten Verbrennungssimulationen im Kontext der LES gekoppelt mit tabellierter Chemie (FGM) drei zusätzliche Transportgleichungen für den gefilterten Mischungsgrad \tilde{Z} , die Reaktionsfortschrittsvariable \tilde{C} und die Varianz des Mischungsgrades $\widetilde{Z''^2}$ gelöst werden:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Z}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{Z}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{(\bar{\mu} + \mu_t)}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right), \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{C}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{C}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{(\bar{\mu} + \mu_t)}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_j} \right) + \tilde{S}_C. \quad (3.31)$$

Der Quellterm \tilde{S}_C in Gleichung (3.31) wird aus der Tabelle gelesen.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\widetilde{Z''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\widetilde{Z''^2}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{(\bar{\mu} + \mu_t)}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{Z''^2}}{\partial x_j} \right) - 2\bar{\rho}\tilde{\chi} + 2\frac{(\bar{\mu} + \mu_t)}{Sc_t} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2. \quad (3.32)$$

Die Transportgleichung für die Mischungsgradvarianz enthält die skalare Dissipationsrate χ , die eine inverse Mischungszeit darstellt. Sie wird in einen aufgelösten und einen Feinstrukturanteil aufgespalten und der Feinstrukturanteil über einen Gradientenflussansatz modelliert:

$$2\bar{\rho}\tilde{\chi} \approx 2\frac{\bar{\mu}}{Sc_t} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 + C\mu_t \frac{\widetilde{Z''^2}}{\Delta^2} \quad \text{mit } C = 2. \quad (3.33)$$

Mit Definition (3.33) und Gleichung (3.32) folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\widetilde{Z''^2}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\widetilde{Z''^2}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{(\bar{\mu} + \mu_t)}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{Z''^2}}{\partial x_j} \right) + 2\frac{\mu_t}{Sc_t} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 - C\mu_t \frac{\widetilde{Z''^2}}{\Delta^2}. \quad (3.34)$$

Kapitel 4

Akustik

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen zur Beschreibung von akustischen Wellen aufgezeigt. Dies reicht von der Definition der notwendigen akustischen Feldgrößen über die darauf folgende Schallausbreitung. Die hierfür notwendigen Grundgleichungen mit ihren Voraussetzungen und Einschränkungen werden hergeleitet und die Bildung der thermoakustischen Quellterme näher erläutert. Im Anschluss wird die Problematik der thermoakustischen Schwingungen und Instabilitäten erläutert und die zur numerischen Berechnungen notwendigen Quellterme hergeleitet.

4.1 Akustische Feldgrößen

Die Akustik ist eine allgegenwärtige Erscheinung, die uns im täglichen Leben begleitet. Es sind über meist erwünschte Geräusche wie unsere Stimme oder Musik, als auch eher unerwünschter Umgebungslärm durch Straßen-, Flug oder Baulärm. Hierbei besteht schon eine Unterscheidung unserer persönlichen Wahrnehmung in den Worten Geräusch bzw. Klang und dem negativ assoziierten Wort Lärm. Die zugrundeliegende Physik zur Beschreibung beider akustischer Wahrnehmungsformen ist identisch. Akustik wird durch die Ausbreitung von Schallwellen begründet. Schall ist durch eine Ausbreitung von kleinen Druck- und Geschwindigkeitsschwankungen mit einer bestimmten im Verlauf näher definierten Ausbreitungsgeschwindigkeit um einen Mittelwert definiert. Dieser Prozess ist in Abbildung 4.1 schematisch am Beispiel einer akustischen Druckschwankung p' gezeigt, welche sich mit der Zeit um einen bestimmten Weg x ausbreitet. Hierbei ergibt sich die Druckschwankung bzw. der Schalldruck p' aus der Differenz zwischen dem momentanen, örtlichen Druck p und dem aerodynamischen Gleichdruck p_0 :

$$p'(x_i, t) = p(x_i, t) - \bar{p}(x_i, t). \quad (4.1)$$

Analog zum akustische Schalldruck kann eine akustische Schalldichte oder auch Wechsel-dichte ρ' definiert werden:

$$\rho'(x_i, t) = \rho(x_i, t) - \bar{\rho}(x_i, t). \quad (4.2)$$

Das Geschwindigkeitsfeld u_i wird ebenfalls einer Skalenseparation unterzogen, womit sich die gerichtete akustische Geschwindigkeitsschwankung um den Geschwindigkeitsmittelwert \bar{u}_i ergibt, die im Rahmen der Akustik als Schallschnelle u'_i bezeichnet wird:

$$u'_i(x_i, t) = u_i(x_i, t) - \bar{u}_i(x_i, t). \quad (4.3)$$

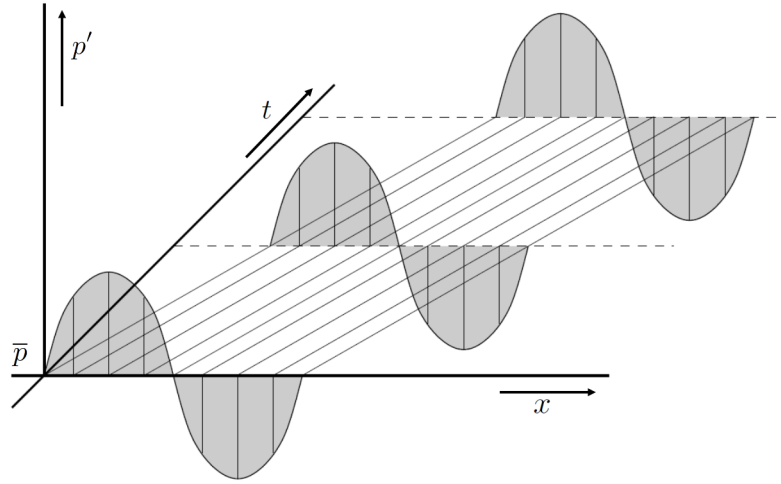


Abbildung 4.1: Wellenausbreitung in Raum und Zeit [31]

Im Vergleich zu ihrem hydrodynamischen Mittelwert sind die sich ergebenden akustischen Schwankung der beschreibenden Größen sehr klein und liegen beispielsweise für die Druckfluktuationen üblicherweise im Bereich von wenigen Pascal (Pa):

$$|p'| \ll \bar{p} \quad , \quad |u'| \ll \bar{u} \quad , \quad |\rho'| \ll \bar{\rho} \quad (4.4)$$

Bei der theoretischen Beschreibung von akustischen Ausbreitungsphänomenen ergibt sich aus der Definition (4.4) die wichtige Vereinfachung, dass die Ausbreitung einer Schallwelle als linearer Prozess zu beschreiben ist.

Eine wichtige Größe zur Bewertung von Schallereignissen ist der Schalldruckpegel L_p , der aufgrund der großen Spanne an real auftretenden Schalldruckfluktuationen in logarithmischer Skalierung angegeben wird:

$$L_p = 20 \cdot \log_{10} \left(\frac{p'_{rms}}{p_{ref}} \right) \text{ dB}. \quad (4.5)$$

Der hier enthaltene Referenzdruck p_{ref} orientiert sich an der wahrgenommenen menschlichen Hörschwelle eines sinusförmigen Tons bei 1kHz und beträgt $2 \cdot 10^{-5}$. In der Definition des Schalldruckpegels (4.5) ist der Effektivwert des Schalldruckes p'_{rms} enthalten, der aus dem Mittelwert des fluktuierenden Schalldruckquadrates gebildet wird:

$$p'_{rms} = \sqrt{\frac{1}{T} \int_T p'^2(t) dt} = \sqrt{\bar{p'^2}}. \quad (4.6)$$

Neben dem Schalldruckpegel L_p existieren noch zahlreiche weitere Größen, mit denen sich die Leistungen und Intensitäten von akustischen Felder quantifizieren lassen. Für die Definition dieser Größen sei an dieser Stelle auf die weiterführende Literatur verwiesen [82, 80]. Neben den Größen zur Quantifizierung eines Schallereignisses existieren elementare Größen zur Charakterisierung des zeitlichen Verhaltens, welche den Wellencharakter angeben. Als erste Größe ist die Frequenz f einer Schallwelle zu nennen, die als inverses Maß der Periodendauer T einer vollendeten Schwingung definiert ist und somit die Anzahl

der vollendeten Schwingungen pro Zeiteinheit angibt:

$$f = \frac{1}{T} \quad (4.7)$$

Mit der Frequenz kann die Kreisfrequenz ω definiert werden:

$$\omega = 2\pi f \quad (4.8)$$

Die zweite charakteristische Größe ist die Wellenlänge λ

$$\lambda = \frac{a}{f} = aT \quad (4.9)$$

In Definition (4.9) gibt a die Schallgeschwindigkeit an, die eine charakteristische Geschwindigkeit angibt, mit der sich die Druckfluktuationen p' in einem Medium ausbreiten. Für die in dieser Arbeit getroffene Annahme einer Ausbreitung in einem idealen Gas, lässt sich die Schallgeschwindigkeit a über die thermodynamische Annahme der isentropen, sprich dissipationsfreien, adiabaten Zustandsänderung berechnen:

$$\frac{p}{\bar{p}} = \left(\frac{\rho}{\bar{\rho}} \right)^\gamma \quad \leftrightarrow \quad p = \frac{\bar{p}}{\bar{\rho}^\gamma} \rho^\gamma. \quad (4.10)$$

Mit der Ableitung $dp/d\rho$ bei fester Temperatur T_0 ergibt sich:

$$a^2 = \left. \frac{dp}{d\rho} \right|_{T_0} = \gamma \frac{\bar{p}}{\bar{\rho}}. \quad (4.11)$$

Woraus sich für ein thermisch ideales Gas mit der universellen Gaskonstante R auf die Schallgeschwindigkeit schließen lässt:

$$a = \sqrt{\gamma \frac{RT}{M}} \quad (4.12)$$

In Definition (4.12) gibt γ den Isentropenexponenten an. Dieser bildet sich über das Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten $\gamma = c_p/c_v$ und nimmt für ein zweiatomiges Gas einen Wert von $\gamma = 1,40$ an. Die Schallgeschwindigkeit a beträgt unter Normalbedingungen ($p = 101325 \text{ Pa}$, $T = 273,15 \text{ K}$ nach DIN-1343) in Luft $a = 331,5 \text{ m/s}$. Aufgrund der sehr kleinen akustischen Fluktuationen wird eine dissipationsfreie Zustandsänderung angenommen. Hinzu kommt das durch die akustischen Wellen lokal kein Temperatúraustausch mit der Umgebung stattfindet, weil die lokalen Verweilzeiten einer akustischen Fluktuation sehr klein sind. Aus diesem Grund ist die Annahme der isentropen Zustandsänderung und der damit angenommenen Ausbreitung von Schallwellen bei konstanten Entropie näherungsweise erfüllt.

4.2 Schallausbreitung

Schallwellen breiten sich, wie vorher erwähnt, in einem Medium mit der charakteristischen Schallgeschwindigkeit a aus. Um die Entstehung und Ausbreitung von Schallwellen mathematisch beschreiben zu können, beinhalten die allgemeinen strömungsmechanischen Erhaltungsgleichungen in ihrer kompressiblen, nichtlinearen Formulierung alle notwendigen Informationen.

4.2.1 Wellengleichungen

Die Entstehung und Ausbreitung von Schallwellen kann mathematisch am einfachsten durch die Herleitung einer Wellengleichung beschrieben werden. Im einfachsten Fall kann ein homogenes, ruhendes Medium mit konstanter Schallgeschwindigkeit angenommen werden, um die Schallausbreitung zu berechnen. Zur Beschreibung der Wellenausbreitung von akustischen Wellen in homogenen, ruhenden Medien werden die linearisierten akustischen Grundgleichung benötigt. Mit Hilfe der Skalenseparationen nach den Definitionen (4.1) und (4.2) sowie der Annahme einer ruhenden Strömung:

$$u'_i(x_i, t) = u_i(x_i, t) \rightarrow \bar{u}_i = 0, \quad (4.13)$$

erhält man mit der Voraussetzung, dass Produkte von akustischen Größen vernachlässigt werden, aus den allgemeinen strömungsmechanischen Erhaltungsgleichungen für die Masse (2.2) und den Impuls (2.6) in ihrer kompressiblen, reibungsfreien, nichtlinearen Formulierung ohne Volumenkräfte die linearisierten akustischen Grundgleichungen (4.14 - 4.16):

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial u'_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial u'_i}{\partial t} + \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p'}{\partial x_j} = 0. \quad (4.15)$$

Um einen Zusammenhang zwischen Schalldruck und Schalldichte herzustellen, dient die Zustandsgleichung (4.16), welche unter der Annahme einer isentropen Zustandsänderung aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik abgeleitet werden kann:

$$p' = \bar{a}^2 \rho'. \quad (4.16)$$

Um aus den akustischen Grundgleichungen eine Wellengleichung für den Schalldruck p' zu erhalten, wird ρ' in Gleichung (4.14) mit Hilfe der Definition (4.16) ersetzt:

$$\frac{1}{\bar{a}^2} \frac{\partial p'}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial u'_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4.17)$$

und die Gleichung (4.17) partiell nach der Zeit $\partial/\partial t$ abgeleitet:

$$\frac{1}{\bar{a}^2} \frac{\partial^2 p'}{\partial t^2} + \rho_0 \frac{\partial u'_i}{\partial x_i \partial t} = 0. \quad (4.18)$$

Die Wellengleichung für p' erhält man, wenn man die in Gleichung (4.18) enthaltene Schnellebeschleunigung $\partial u'_i/\partial t$ durch die Gleichung (4.15) ersetzt:

$$\frac{1}{\bar{a}^2} \frac{\partial^2 p'}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 p'}{\partial x_j^2} = 0. \quad (4.19)$$

Analog lautet die Wellengleichung für die Schallschnelle u' :

$$\frac{1}{\bar{a}^2} \frac{\partial^2 u'}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u'}{\partial x_j^2} = 0. \quad (4.20)$$

Mit diesen einfachen Wellengleichungen kann die Ausbreitung von Schallwellen mit der Schallgeschwindigkeit a in einem ruhenden, homogenen Medium berechnet werden. Die Entstehung der akustischen Schwankungen muss hierbei über geeignete Quellterme auf der rechten Seite der Wellengleichungen eingefügt werden. [91] erweiterte die homogene Wellengleichung für heterogene akustische Medien durch die Ableitung einer Energiegleichung für reagierende Strömungen. Bei dieser Herleitung wird die Schallgeschwindigkeit a nicht als konstant angenommen und die Definition (4.16) durch eine Energiegleichung ersetzt. Hiermit können Brechnungseffekte infolge der variierenden Schallgeschwindigkeit abgebildet werden. Die resultierende inhomogene Wellengleichung enthält im Partikulärteil die instationäre Wärmefreisetzung, die als dominanter Quellterm in turbulenten Verbrennungssystemen identifiziert wurde [66, 62, 91, 52, 15].

Auf Basis der kompressiblen, reibungsbehafteten nichtlinearen Navier-Stokes Gleichungen (2.2),(2.8) ohne Volumenkräfte leitete Lighthill eine Wellengleichung ab, die noch heute für die Berechnung von strömungsinduziertem Schall Verwendung findet und als Lighthillsche Analogie bekannt ist. Hierbei führte Lighthill eine Separation der nichtlinearen und linearen Terme durch, so dass auf der linken Seite der abgeleiteten Wellengleichung lineare die Wellenausbreitung beschreibende Terme stehen, und auf der rechten Seite die komplizierten nichtlinearen Terme die akustischen Quellterme in turbulenten Strömungen repräsentieren [75, 76]. Die Wellengleichung nach Lighthill erhält man, wenn man die nichtlineare Kontinuitätsgleichung (2.2) mit der zeitlichen partiellen Ableitung $\partial/\partial t$ multipliziert und die Divergenz $\partial/\partial x_j$ von der nichtlinearisierten Impulsgleichung (2.8) bildet:

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) = 0 \quad (4.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\rho u_i u_j + P_{ij}) = 0 \quad (4.22)$$

P_{ij} in Gleichung (4.22) beinhaltet die Reibungseffekte und den Druckterm, der später genauer definiert wird. Die Gleichungen (4.21),(4.22) enthalten einen identischen Term, der bei der folgenden Subtraktion der beiden Gleichungen eliminiert wird:

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\rho u_i u_j + P_{ij}). \quad (4.23)$$

Die rechte Seite in Gleichung (4.23) enthält nun die Nichtlinearitäten und Reibungseffekte. Nach dem separieren der linearen und nichtlinearen Terme werden die Skalenseparationen (4.1),(4.2) eingeführt. Um aus der erhaltenen Gleichung auf der linken Seite eine Wellengleichung zu erhalten, muss die erhaltene Gleichung mit:

$$a_0^2 \frac{\partial^2 \rho'}{\partial x_k^2} = a_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\delta_{ij} \rho') \quad (4.24)$$

subtrahiert werden. Hiermit ergibt sich eine inhomogene Wellengleichung auf Basis der Schalldichte ρ' , die auf der linken Seite eine lineare Wellenausbreitung mit einer Ausbreitungsgeschwindigkeit a_0 beschreiben kann und auf der rechten Seite diverse akustische Quellen enthält:

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - a_0^2 \frac{\partial^2 \rho'}{\partial x_j^2} = \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (\rho u_i u_j - \tau_{ij} + \delta_{ij} (p' - a_0^2 \rho')) \quad (4.25)$$

Der Ausdruck in den Klammern auf der rechten Seite der Gleichung (4.25) ist als Lighthillscher Spannungstensor T_{ij} bekannt:

$$T_{ij} = \rho u_i u_j - \tau_{ij} + \delta_{ij}(p' - a_0^2 \rho'). \quad (4.26)$$

T_{ij} beinhaltet die akustischen Quellen, die in einer turbulenten Strömung auftreten und stellt durch die zweite räumliche Ableitung eine Quadrupolquelle dar. Die hier gezeigte Lighthillsche Analogie gibt die klassische Herleitung der Lighthillschen Wellengleichung an, die über eine Schalldichte definiert ist. Erfolgt die Herleitung mit einem Schalldruck, so enthält die Gleichung auf der rechten Seite eine Monopolquelle und eine Quadrupolquelle. Für die Lighthillsche Gleichung (4.25) lässt sich mit Hilfe der Green'schen Funktion im freien Raum eine analytische Fernfeldlösung über eine Formulierung als Volumenintegral angeben. Die Integralmethoden haben eine weite Anwendung in Gebieten, in denen die Berechnung von kompakten akustischen Quellen im Vordergrund steht und die akustische Lösung an diskreten Orten berechnet werden soll. Die Lighthillsche Analogie ist begrenzt auf die Entstehung und Ausbreitung von Schallwellen im freien Raum und kann keine schallfesten Beschränkungen im Rechengebiet berücksichtigen. In hybrides Verfahren wird für die Berechnung der Quellterme für die Lighthillschen Gleichung ein kompressibles Verfahren zur Berechnung der akustischen Quellterme erforderlich [97]. Um schallfeste Begrenzungen in die Berechnung zu integrieren, wurde von [33] eine Erweiterung der Lighthillschen Formulierung vorgenommen, die als Ffwoes Williams und Hankings Formulierung (FW-H) bekannt ist und heute am meisten verwendet wird. Im Rahmen dieser Arbeit wurden keine integralen, analytischen Fernfeldmethoden zur Berechnung von turbulentem Verbrennungslärm verwendet, so dass hier für detailliertere Informationen auf weiterführende Literatur verwiesen wird [73, 80]. Akustische Quellen im Bereich des turbulenten Verbrennungslärms sind aufgrund der turbulenten Strömungsbewegung räumlich dreidimensional verteilt und somit nicht als kompakt anzunehmen. Aus diesem Grund bieten sich volumetrische Diskretisierungsverfahren zur Berechnung an [73].

4.2.2 Linearisierte Euler-Gleichungen

Bei genauerer Betrachtung der vorgestellten Wellengleichungen enthalten diese keinen konvektiven Transportterm und sind somit nicht geeignet, die Konvektion von Schallwellen zu berücksichtigen. Bei der Fernfeldbetrachtungsweise spielt die Eigenschaft des konvektiven Transportes von Schallwellen eine untergeordnete Rolle und kann vernachlässigt werden. Bei der Betrachtung von eingeschlossenen technischen Verbrennungssystemen kann die Konvektion, abhängig von der vorherrschenden Schallgeschwindigkeit a , einen nicht unerheblichen Anteil an der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Schallwellen beitragen. Die linearisierten Euler-Gleichungen (engl. *Linearized Euler Equations*, kurz LEE) bieten die Möglichkeit, die Entstehung und Ausbreitung von Schallwellen in heterogenen Strömungen zu berechnen, wobei auftretende Brechungseffekte in komplexen Geometrien berücksichtigt werden. Zur Lösung der LEE müssen 5 Variablen, sogenannte Störgrößen numerisch berechnet werden. Die LEE basieren auf den, in Kapitel 2.1 vorgestellten, strömungsmechanischen Erhaltungsgleichungen für die Masse (2.2) und den Impuls (2.6). Zur Herleitung der LEE wird, anstelle der Impulsgleichung (2.6) aus dem Kontext der Navier-Stokesschen Formulierung, die namensgebende Euler-Gleichung verwendet, die im

Vergleich zur Impulsgleichung (2.6) keine Reibungseffekte und Volumenkräfte enthält. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die akustische Berechnung mit Hilfe des akademischen CAA-Lösers PIANO (engl. *Perturbation Investigation of Aerodynamic Noise*, kurz PIANO), entwickelt vom Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), durchgeführt. PIANO basiert auf einer physikalisch dimensionslosen Formulierung der LEE, bei der alle 5 verwendeten Variablen mit den Fernfeldgrößen normiert werden:

$$p = \frac{p^*}{p_\infty a_\infty^2}, \quad \rho = \frac{\rho^*}{\rho_\infty}, \quad u_j = \frac{u_j^*}{a_\infty}, \quad x_i = \frac{x_i^*}{L}, \quad t = t^* \frac{a_\infty}{L}. \quad (4.27)$$

Die gesternten (\star) Größen repräsentieren die realen, lokal vorherrschenden Größen mit einer physikalischen Dimension, welche mit den im Fernfeld anzutreffenden physikalischen Größen für den Druck p_∞ , der Dichte ρ_∞ , der Schallgeschwindigkeit a_∞ und einer charakteristischen Länge L normiert werden. Zur Herleitung der linearisierten Euler-Gleichungen werden die Skalenseparationen (4.1)-(4.3) in die genannten Erhaltungsgleichungen für Masse und Impuls eingesetzt:

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + u'_i \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_i} + \frac{\partial \rho'}{\partial x_i} (\bar{u}_i + \epsilon u'_i) + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \rho' + \frac{\partial u'_i}{\partial x_i} (\bar{\rho} + \epsilon \rho') = 0 \quad (4.28)$$

$$\frac{\partial u'_i}{\partial t} + u'_i \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} (\bar{u}_i + \epsilon u'_i) + \frac{1}{\bar{\rho}} \left(1 - \epsilon \frac{\rho'}{\bar{\rho}} \right) \left(\frac{\partial p'}{\partial x_j} + \rho' \bar{u}_i \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial p'}{\partial t} + u'_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial p'}{\partial x_i} (\bar{u}_i + \epsilon u'_i) + \kappa \left[\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} p' + \frac{\partial u'_i}{\partial x_i} (\bar{p} + \epsilon p') \right] = 0 \quad (4.30)$$

Die homogenen linearisierten Euler-Gleichungen (4.28)-(4.30) können den Transport von Druck-, Dichte- (Entropie) und Wirbelschwankungen in komplexen Geometrien mit heterogenen Grundströmungen abbilden. Scherströmungsinstabilitäten werden vernachlässigt, indem Terme quadratischer und höherer Ordnung nicht berücksichtigt werden. Desweiteren sind in der gezeigten Formulierung keine strömungsinduzierten akustische Quellen enthalten, weil die turbulenten Verbrennungslärmquellen dominieren [66, 22, 62, 91, 14]. Um die Entstehung und Schallausbreitung in turbulenten Verbrennungssystemen beschreiben zu können, werden auf der rechten Seite der LEE akustische Quellterme benötigt, die im folgenden auf Basis einer Druck-Dichte Relation hergeleitet werden sollen.

4.3 Thermoakustik

Die Thermoakustik beschreibt ein Spezialgebiet der Akustik und der Thermodynamik, in dem durch thermische Umwandlungsprozesse Schall bzw. akustische Druckfluktuationen erzeugt werden. Dieses Phänomen tritt in einer Vielzahl von thermischen Apparaturen auf und ist sehr stark von den Betriebsbedingungen abhängig. Unter gewissen betrieblichen und geometrischen Voraussetzungen können diese akustischen Druckfluktuationen in Brennkammern derart groß werden, dass eine Zerstörung der Brennkammer auftreten kann. Im Jahr 1802 berichtete Higgings über ein Experiment mit einer Wasserstoffflamme, über der er verschieden lange und dicke Glasrohre platzierte, welche abhängig von den geometrischen Abmessungen gewisse tonale Töne erzeugten (*Singing Flames*) oder

sogar die Flamme verlöschte [7]. Flammeninstabilitäten, hervorgerufen durch einen Energietransfer zwischen thermischer Energie und akustischen Fluktuationen, wurden erstmals von Rayleigh 1878 [95] mit Hilfe, des nach ihm benannten, akustischen Rayleigh-Kriteriums beschrieben:

$$E = \int_V \int_t p'(t) \dot{q}'(t) dt dV \geq 0 \quad (4.31)$$

Das Rayleigh-Kriterium beschreibt, nach dem rechtsläufigen thermodynamischen Kreisprozess, die Umwandlung von Wärme in mechanische Arbeit. Wenn die zugeführte Energie E größer Null ist und die Dämpfungseffekte in der Brennkammer übersteigt, können thermoakustische Instabilitäten auftreten, bei denen thermische in akustische Energie umgewandelt und die akustische Druckschwingungsamplitude steigt. Dies trifft zu, wenn ein Maxima der akustischen Druckfluktuation in einem Volumen gleichzeitig mit einer erhöhten Wärmefreisetzung wechselwirkt und somit eine Phasengleichheit zwischen den beiden Mechanismen besteht. Die entstehende selbsterregte Brennkammerschwingung beeinflusst die Frequenz und Amplitude des Systems und kann zu deren Zerstörung führen [26]. Die ersten theoretischen Arbeiten zu thermoakustischen Instabilitäten bei Raketenantriebswerken wurde von Crocco und Cheng [23] Ende der 1950er Jahre unternommen. Diese Arbeiten markieren den Grundstein in der Beschreibung von thermoakustischen Instabilitäten. Neben den selbsterregten Schwingungen, die immer eine akustische Rückkopplung zwischen der instationären Wärmefreisetzung und den akustischen Eigenschaften des Systems darstellt, treten immer fremderregte Schwingungen auf, die durch die Verbrennung und durch turbulente Strömungsbewegungen erzeugt werden. Hierbei verstärkt die Verbrennung die stets vorhandenen Strömungsgeräusche. Diese akustischen Fluktuationen, die auch als Verbrennungslärm bekannt sind, können sich bei der Anregung einer Systemeigenfrequenz ebenfalls verstärken und eine Beeinflussung des Gesamtsystems zur Folge haben. Bei der Entwicklung von neuen Brennkammern wird hinsichtlich ihres thermoakustischen Verhaltens heute zum einen auf die generelle Geräuschemission, also auf den durch die turbulente Verbrennung erzeugten Verbrennungslärm als auch zum anderen auf möglicherweise im Betrieb auftretende thermoakustische Instabilitäten geachtet. Der Unterschied zwischen den zwei akustischen Phänomenen des Verbrennungslärms und den thermoakustischen Instabilitäten besteht in ihrer Wirkungsweise. Beim Verbrennungslärm erzeugt die turbulente Flamme ein akustisches Signal, welches die Flamme nicht oder nur in geringem Maße beeinflusst. Man spricht in diesem Zusammenhang von einer Einwegkopplung zwischen der Flamme und der Akustik. Anders sieht es bei den thermoakustischen Instabilitäten aus. Hier wird durch die turbulente Flamme eine Störung erzeugt, die zusammen mit der Geometrie einen Effekt auslöst, der die Flamme und das Strömungsfeld beeinflussen kann. Deswegen wird im Zusammenhang der thermoakustischen Instabilitäten von einer Zweizege- bzw. Rückkopplung gesprochen. Thermoakustische Instabilitäten haben einen enormen Einfluss auf alle Strömungsparameter, die Flammenbewegung sowie die Wärmeübertragung in der Brennkammer und können zu einem Kontrollverlust des Systems und deren Zerstörung führen. Auf der anderen Seite besitzen Brennkammern nahe der Instabilitäten eine extrem hohe Effizienz. Die Ausbrandrate und die Wandwärmeflüsse sind bei instabilen Betriebsbedingungen erhöht [24, 25] und die Schadstoffemissionen sind bei instabilen stets unter denen bei stabilen Betriebsbedingungen [57]. Wie in Abbildung 4.2 verdeutlicht, werden thermoakustische Schwingungen durch direkte und indirekte Quellmechanismen hervorgerufen und sind aufgrund der un-

terschiedlichen Erzeugungs- und Ausbreitungsmechanismen sehr schwer vorherzusagen.

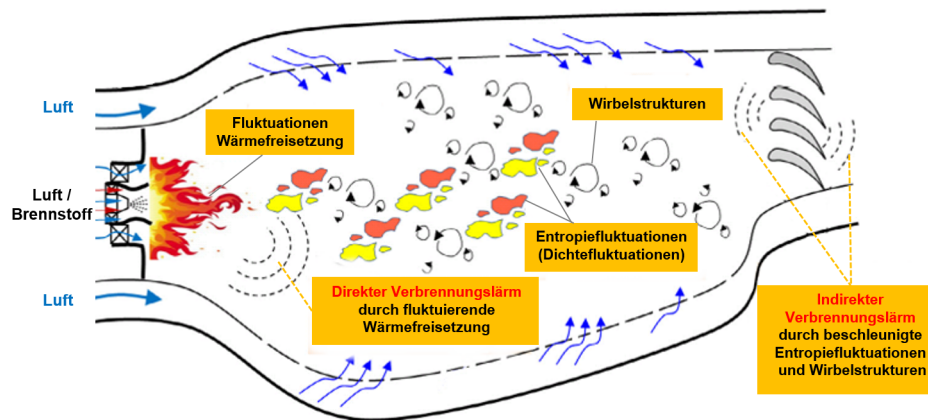


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung der Erzeugungsmechanismen von thermoakustischen Schwingungen in einer Triebwerksbrennkammer [27]

Direkter Verbrennungslärm

Direkter Verbrennungslärm hat seinen Ursprung, wie in Abbildung 4.2 anschaulich verdeutlicht wird, in Regionen, in denen durch die chemische Umsetzung eines reaktionsfähigen Gemisches starke thermische Dichteänderungen auftreten. Gekennzeichnet sind diese Regionen durch hohe Wärmefreisetzungsraten die durch turbulente Mischungsvorgänge lokal und zeitlich starken Schwankungen unterliegen. Der direkte turbulente Verbrennungslärm ist bei niedrigen Machzahlen mindestens zwei Größenordnungen größer als turbulenter Strömungslärm [108, 109, 113] und erzeugt ein breitbandiges Frequenzspektrum, welches im unteren Frequenzbereich die größten Amplituden aufweist. Untersuchungen haben gezeigt, dass die dominante Verbrennungslärmquelle durch die instationäre Wärmefreisetzungsrate \dot{q}' bestimmt ist [66].

Indirekter Verbrennungslärm

Der indirekte Verbrennungslärm hängt von dem Betriebszustand und der Geometrie der Brennkammer ab und kann nur in eingeschlossenen Systemen auftreten. Ein Mechanismus zur Erzeugung von indirektem Verbrennungslärm ist, wie in Abbildung 4.2 veranschaulicht, durch die positive oder negative Beschleunigung von Entropiefluktuationen (Dichtewellen) und turbulenten Wirbelstrukturen begründet. Diese entstehen in technischen Verbrennungssystemen durch aerodynamisch, sowie akustisch erzeugte Unterschiede in der chemischen Umsetzungsrate und werden mit Strömungsgeschwindigkeit durch die Brennkammer transportiert. Erreichen diese Strukturen einen kritischen Querschnitt und werden beschleunigt, erzeugen sie eine akustische Druckfluktuation die sich mit Schallgeschwindigkeit ausbreitet und stromauf die Flamme beeinflussen kann [79, 93]. Erreicht die abgestrahlte Druckfluktuation die Flamme phasengleich mit einer erhöhten Wärmefreisetzungsrate, wird die entstehende abschwimmende Dichtewelle

verstärkt und es kommt zu einer Rückkopplung der Akustik auf die Verbrennung, welche im schlechtesten Fall zu thermoakustischen Instabilitäten führen kann. Diese indirekt erzeugten Brennkammerschwingungen zeichnen sich durch niederfrequente Schwingungen aus, die bei stationären Gasturbinenbrennkammern im Bereich zwischen 10 bis 100Hz und bei Fluggasturbinenbrennkammern zwischen 50 bis 150Hz liegen [56]. Aus diesem Mechanismus resultiert bei Fluggasturbinen beim Hochfahren die zeitweise auftretenden Äquivalenzverhältnisschwankungen, die zu einem Schwingungsphänomen führen, welches als *Rumble* bezeichnet wird [74]. Es konnte von [30] gezeigt werden, dass durch die zurücklaufende Druckfluktuation die Zerstäubung bei einem Diffusionsflammenbrenner beeinflusst wird.

4.3.1 Thermoakustische Quellen

Die erste Arbeit zur Quantifizierung von thermoakustischen Effekten bei offenen turbulenten Flammen wurde von Bragg [9] in den frühen 1960er Jahren vorgestellt. Kurz darauf erweiterten Kotake & Hatta [67] die Lighthillschen Analogien mit Hilfe des ersten Gesetzes der Thermodynamik für die Berechnung von reagierenden Strömungen. In der Folge wurden zahlreiche Arbeiten veröffentlicht, die sich mit der akustischen Effekten von reagierenden Strömungen beschäftigten [21, 115, 22, 121, 62]. Dowling [22] zeigte auf Basis einer Energieerhaltungsgleichung für reagierende Strömungen [125] eine vollständige Quelltermformulierung im Kontext der Lighthillschen Analogie. Dieses Konzept basiert auf der Formulierung der *excess density* ρ_e , die aus den skalaren Druck- und Dichtetermen des Lighthillschen Spannungstensors T_{ij} (4.26) gewonnen wird:

$$\rho_e = \rho - \bar{\rho} - (p - \bar{p}/a_0^2) = \rho' - \frac{p'}{a_0^2} \quad (4.32)$$

Die *excess density* ρ_e verschwindet im akustischen Fernfeld bei Umgebungsbedingungen und ist in Bereichen, in denen irreversible thermodynamische Prozesse stattfinden, wie es in Verbrennungssystemen der Fall ist, ungleich Null. Dieser Formulierung wird, wie bei [14] vorgeschlagen, in dieser Arbeit gefolgt und für die Herleitung der thermoakustischen Quellterme verwendet. Auf Basis der Definition (4.32) lässt sich eine Druck-Dichte Relation angeben:

$$\frac{\partial p'}{\partial t} - \bar{a}^2 \frac{\partial \rho'}{\partial t} = -\bar{a}^2 \frac{\partial \rho_e}{\partial t}. \quad (4.33)$$

Die zeitliche Änderung der *excess density* ρ_e lässt sich mit Hilfe ihrer materiellen Ableitung definieren:

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} = \frac{D\rho_e}{Dt} - u_j \frac{\partial \rho_e}{\partial x_j}. \quad (4.34)$$

In Definition (4.34) wird der letzte Term durch die in seiner Bedeutung identische Formulierung:

$$u_j \frac{\partial \rho_e}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_e u_j) - \rho_e \frac{\partial u_j}{\partial x_j}. \quad (4.35)$$

substituiert und man erhält:

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} = \frac{D\rho_e}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_e u_j) + \rho_e \frac{\partial u_j}{\partial x_j}. \quad (4.36)$$

Letztendlich wird die Kontinuitätsgleichung (2.2) mit der materiellen Ableitung der Dichte $D\rho/Dt$ so umgeformt, dass der letzte Term, in der eben erhaltenen Definition (4.36), umgeformt werden kann und man die Ausgangsgleichung für energetische Herleitung der thermoakustischen Quellen bekommt:

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} = \frac{D\rho_e}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho_e u_j) - \frac{\rho_e}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} \quad (4.37)$$

Ersetzt man in der Definition (4.37) die *excess density* ρ_e durch die Mittelwerte und akustischen Schwankungsgrößen aus der Definition (4.32), so erhält man eine Vielzahl physikalischer, akustischer Quellen in der Druck-Dichte Relation (4.33):

$$\begin{aligned} \frac{\partial p'}{\partial t} - \bar{a}^2 \frac{\partial \rho'}{\partial t} = & -\bar{a}^2 \left[\left(\frac{\bar{\rho}}{\rho} + \frac{p - \bar{p}}{\rho \bar{a}^2} \right) \frac{D\rho}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_j}(u_j \rho_e) \right. \\ & \left. - u_j \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} - \frac{D}{Dt} \left(\frac{p - \bar{p}}{\bar{a}^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.38)$$

Die rechte Seite der Definition (4.38) enthält sowohl strömungs- als auch verbrennungsinduzierte Schallquellen, die eine Berechnung von direktem als auch indirektem Verbrenungslärmquellen abbilden können. Für die mathematische Beschreibung der Verbrenungslärmquellen wird die materielle Ableitung der Dichte $D\rho/Dt$ durch eine Energiegleichung von Williams [125] ersetzt:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{1}{\bar{a}^2} \frac{Dp}{Dt} + \frac{\alpha_t}{c_p} \left(\sum_{\alpha=1}^{\alpha_{max}} \frac{\partial h}{\partial Y_\alpha} \bigg|_{\rho, p, Y_m} \rho \frac{DY_\alpha}{Dt} + \frac{\partial q_j}{\partial x_j} - \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tau_{ij} \right) \quad (4.39)$$

In der Energiegleichung von Williams gibt α_t einen volumetrischen thermischen Expansionskoeffizienten an, der für ein ideales Gas gleich der reziproken Temperatur T ist, Y_α beschreibt den Massenbruch der Spezies α , h gibt die spezifische Enthalpie an, q steht für den Wärmefluss und τ_{ij} gibt den Energieeintrag infolge von Reibungseffekten an. Um die verbrennungsinduzierten Schallquellen im Detail zu betrachten, wird der zweite Term in der Energiegleichung (4.39) mit der Speziestransportgleichung (2.11):

$$\rho \frac{DY_\alpha}{Dt} = \dot{\omega}_\alpha - \frac{\partial}{\partial x_j} J_j^\alpha \quad (4.40)$$

substituiert, worin J_j^α den diffusiven Stofftransport der Spezies α und $\dot{\omega}_\alpha$ den chemischen Quellterm der Spezies α repräsentiert. Mit dieser Definition und der Anwendung der Kettenregel ergibt sich:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^{\alpha_{max}} \frac{\partial h}{\partial Y_\alpha} \bigg|_{\rho, p, Y_m} \rho \frac{DY_\alpha}{Dt} = & \underbrace{\sum_{\alpha=1}^{\alpha_{max}} \frac{\partial h}{\partial Y_\alpha} \bigg|_{T, p, Y_m} \dot{\omega}_\alpha}_{S_I} - \underbrace{\frac{\partial h}{\partial \rho} \bigg|_{p, Y_m} \left(\sum_{\alpha=1}^{\alpha_{max}} \frac{\partial \rho}{\partial Y_\alpha} \bigg|_{T, p, Y_m} \dot{\omega}_\alpha \right)}_{S_{II}} \\ & - \underbrace{\sum_{\alpha=1}^{\alpha_{max}} \frac{\partial h}{\partial Y_\alpha} \bigg|_{\rho, p, Y_m} \frac{\partial J_j^\alpha}{\partial x_j}}_{S_{III}}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Mit der gezeigten Aufspaltung der verbrennungsinduzierten Schallquellen erhält man eine sehr komplizierte und umfangreiche Druck-Dichte Relation die alle physikalischen Schallquellen beinhaltet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p'}{\partial t} - \bar{a}^2 \frac{\partial \rho'}{\partial t} = & - \bar{a}^2 \left[\left(\frac{\bar{\rho}}{\rho} + \frac{p - \bar{p}}{\rho \bar{a}^2} \right) \underbrace{\left(\frac{1}{\bar{a}^2} \frac{Dp}{Dt} + \frac{\alpha_t}{c_p} \left(S_I + S_{II} + S_{III} + \frac{\partial q_j}{\partial x_j} - \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tau_{ij} \right) \right)}_{D\rho/Dt} \right. \\ & \left. - \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j \rho_e) - u_j \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} - \frac{D}{Dt} \left(\frac{p - \bar{p}}{\bar{a}^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.42)$$

In der vollständigen Druck-Dichte Relation (4.42) beschreibt der Term oberhalb der geschweiften Klammer, gekennzeichnet mit $D\rho/Dt$, den Teil der aus der Energiegleichung (4.39) resultiert und eine direkte Schallquelle widerspiegelt. Hierin beschreibt S_I die instationäre Wärmefreisetzung infolge der chemischen Umwandlungsprozesse pro Volumeneinheit und repräsentiert unter bestimmten Voraussetzungen die dominierende Verbrennungslärmquelle. Eine zweite sehr dominante Verbrennungslärmquelle wird durch S_{II} wiedergegeben. S_{II} gibt die Schallquelle bei nicht-isomolarer Verbrennung an und wurde von [121] näher untersucht. S_{III} beschreibt den akustischen Effekt infolge der Speziesdiffusion. Die beiden letzten Terme unter der geschweiften Klammer beschreiben die Quellen durch thermische Diffusion sowie infolge der viskosen Effekte. Der Term, der die *excess density* ρ_e beinhaltet, gibt eine indirekte akustische Schallquelle an, die infolge der Beschleunigung von Dichtefluktuationen hervorgerufen wird und als Entropielärm bezeichnet wird. Die verbleibenden beiden Terme repräsentieren direkte akustische Quellen, die durch Strömungsschwankungen mit variierender mittlerer Dichte sowie Druck hervorgerufen werden.

4.3.2 Vereinfachte thermoakustische Quellen

Die rechte Seite der Druck-Dichte Relation (4.42) gibt den vollständigen thermoakustischen Quellterm an. Die vollständige Lösung würde einen erheblichen Rechenaufwand mit sich bringen. Ein weiteres Problem ist es die benötigten Daten aus einer reagierenden LES zu extrahieren. Aus diesen Gründen bietet es sich an, ähnlich wie bei der Chemietabellierung oder der Turbulenzmodellierung, die wesentlichen akustischen Effekte durch vereinfachende Annahmen aus der vollständigen Formulierung des thermoakustischen Quellterms herauszufiltern. In der Arbeit von [14] wurde eine analytische Abschätzung der Größenordnungen der unterschiedlichen Quellterme vorgenommen. Zur Quantifizierung der verbrennungsinduzierten Quellterme wurde eine vorgemischte Flamme bei niedriger Machzahl mit einer DNS gerechnet und die Effekte der einzelnen Verbrennungslärmquellen ausgewertet. In zahlreichen Arbeiten wurde gezeigt, dass die verbrennungsinduzierten Quellterme in reagierenden Strömungen im Vergleich zu strömungsinduzierten Quellen dominieren [112, 67, 14]. Besonders die instationäre Wärmefreisetzung, dargestellt durch S_I in der Druck-Dichte Relation (4.42), spielt hier eine entscheidende Rolle. Im Verbrennungskontext stellen die instationäre Wärmefreisetzung S_I neben den akustischen Effekten der nicht-isomorphen Verbrennung S_{II} die dominierenden akustischen Quellen dar [14, 121].

Aus diesen Gründen kann eine deutliche Vereinfachung des Quellterms auf der rechten Seite der Druck-Dichte Relation vorgenommen werden, die lediglich aus der materiellen Ableitung der Dichte besteht:

$$\frac{\partial p'}{\partial t} - \bar{a}^2 \frac{\partial \rho'}{\partial t} = -\bar{a}^2 \left(\frac{\bar{\rho}}{\rho} + \frac{p - \bar{p}}{\rho \bar{a}^2} \right) \frac{D\rho}{Dt}. \quad (4.43)$$

In der Definition (4.43) beschreibt der zweite Term in den Klammern eine Druckfluktuation, die quadratisch mit der Machzahl skaliert und deswegen im Rahmen der hier angenommen Low-Machzahl Annahme vernachlässigbar ist, weil der hydrodynamische Druck als konstant angenommen werden kann [14]. Hiermit ergibt sich der vereinfachte thermoakustische Quellterm zu:

$$\frac{\partial p'}{\partial t} - \bar{a}^2 \frac{\partial \rho'}{\partial t} = -\bar{a}^2 \frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{D\rho}{Dt}. \quad (4.44)$$

Der in dieser Arbeit vornehmlich verwendete Quellterm, stellt eine zweite Variante eines vereinfachten thermoakustischen Quellterms dar und wird im Folgenden hergeleitet. Hierzu wird der vorher beschriebene Quellterm nach Definition (4.44) um die indirekte Entropielärmquelle und die räumliche Änderung der mittleren Dichte erweitert und vorausgesetzt, dass innerhalb des Quellterms keine Druckfluktuationen berücksichtigt werden $\rho_e \approx \rho - \bar{\rho}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p'}{\partial t} - \bar{a}^2 \frac{\partial \rho'}{\partial t} &= -\bar{a}^2 \left[\frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j \rho_e) - u_j \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} \right] \\ &= -\bar{a}^2 \left[\frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} - \left(u_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} - u_j \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} + \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} \right) - u_j \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} \right]. \end{aligned} \quad (4.45)$$

In dieser Formulierung wurde die Divergenz der Geschwindigkeit ($\bar{\rho} \partial u_j / \partial x_j$) mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung (2.2) ersetzt und man erhält einen sehr reduzierten Ausdruck für den thermoakustischen Quellterm, den man wiederum mit der Kontinuitätsgleichung vereinfacht schreiben kann:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p'}{\partial t} - \bar{a}^2 \frac{\partial \rho'}{\partial t} &= -\bar{a}^2 \left(-u_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} - \rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) \\ &= -\bar{a}^2 \frac{\partial \rho}{\partial t}. \end{aligned} \quad (4.46)$$

In dieser Arbeit wurde der thermoakustische Quellterm nach der Definition (4.46) verwendet. Die partielle Änderung der Dichte $\partial \rho / \partial t$ beschreibt einen, mit sehr wenigen vereinfachenden Annahmen, abgeleiteten thermoakustischen Quellterm dar, der ohne zusätzlichen Aufwand aus der reagierenden LES gewonnen werden kann. Diese Quelltermformulierungen sind für die hybride Berechnung mit einem inkompressiblen CFD-Code geeignet und müssen bei der Verwendung einer kompressiblen Version erweitert werden [14].

4.3.3 Thermoakustische Instabilitäten

Wie eingangs in Kapitel 4.3 erwähnt, werden thermoakustische Instabilitäten über eine komplexe, geometrieabhängige Wechselwirkung von akustischen Schwingungen mit der

instationären Wärmefreisetzungsrate hervorgerufen. Hierbei tritt bei entsprechender Phasenlage eine Verstärkung der akustischen Schwankungen auf, wenn diese mit der instationären Wärmefreisetzung gleichzeitig ein Maximum aufweist. In jüngerer Zeit wurde für turbulente, vorgemischte Flammen ein lokales Rayleigh-Kriterium hergeleitet [71], welches auf Basis einer akustischen Energiebetrachtung einen akustischen Quellterm für die Interaktion zwischen der Flamme und der Akustik wiedergeben kann. Hiermit lässt sich die Verstärkung der akustischen Schwankungen beschreiben:

$$\frac{\gamma - 1}{\gamma \rho a^2} \ln \left(\frac{p}{\bar{p}} \right) S_I > 0. \quad (4.47)$$

S_I ist die Wärmefreisetzungsrate pro Volumenelement, wie es in der Gleichung (4.41) erwähnt wurde. Aufgrund dessen kann die rechte Seite des vereinfachten thermoakustischen Quellterms (4.43) zur Herleitung eines Quellterms verwendet werden, der die Flamme-Akustik Interaktion und somit die akustische Verstärkung wiedergeben kann:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p'}{\partial t} - \bar{a}^2 \frac{\partial \rho'}{\partial t} &= -\bar{a}^2 \left(\frac{\bar{\rho}}{\rho} + \frac{p - \bar{p}}{\rho \bar{a}^2} \right) \frac{\alpha_t}{c_p} S_I \\ &= -\bar{a}^2 \left(1 + \frac{p - \bar{p}}{\gamma \bar{p}} \right) \frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{\gamma - 1}{\bar{a}^2} S_I. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Die Definition (4.48) basiert auf der Formulierung des vereinfachten thermoakustischen Quellterms (4.43), bei dem nur die instationäre Wärmefreisetzung S_I berücksichtigt wird. Um Aussagen über die akustische Verstärkung bzw. Dämpfung der Flamme-Akustik Interaktion treffen zu können, wird die Druckfluktuation des Quellterms nicht vernachlässigt und man erhält im Kontext der numerischen Simulation aus dem zweiten Teil der Definition (4.48) eine Information über die Verstärkung bzw. Dämpfung der akustischen Signale in einem bestimmten Volumen über:

$$\int_V \frac{\gamma - 1}{\gamma \bar{p}} p' \dot{\omega}_\alpha dV. \quad (4.49)$$

Thermoakustische Instabilitäten treten bei definierten Betriebsbedingungen in eingeschlossenen Verbrennungssystemen auf und werden durch eine Interaktion zwischen akustischen Wellen und der Verbrennung hervorgerufen. Die selbsterregten Schwingungen können mit einer diskreten Frequenz wahrgenommen werden, welche eine Eigenfrequenz des Systems darstellt, .

Dieses unerwünschte Phänomen wird häufig in mager, vorgemischten Gasturbinenbrennkammern beobachtet [105, 74, 28, 68]. In Gasturbinenbrennkammern ist die Ursache für die Entstehung von thermoakustischen Instabilitäten aufgrund der komplexen geometrischen Eigenschaften sehr vielfältig und noch nicht abschließend begründet. Es treten eine Vielzahl von Wechselwirkungen zwischen der Brennkammer, deren Brennstoff- und Luftzuführungen, der Turbine sowie dem Verdichter auf, welche die Verbrennung und die akustische Wechselwirkung beeinflussen und eine Ursache für die Entstehung von Instabilitäten sein können. Strömungsinduzierte große kohärente Wirbelstrukturen spielen hierbei in technischen Verbrennungssystemen eine entscheidende Rolle bei den Mischungs- und Verbrennungsprozessen und beeinflussen direkt die instationäre Wärmefreisetzung.

Hierdurch können diese großskaligen Strukturen bei einer Anregung von Brennkammer-eigenfrequenzen die Entstehung von thermoakustischen Instabilitäten hervorrufen [86]. Druckschwingungen in der Brennkammer beeinflussen den Massenstrom in der Brennstoff- und Luftzufuhr und erzeugen somit eine fluktuierende Wärmefreisetzung in der Reaktionszone, die bei bestimmten Bedingungen zu einer Rückkopplung der Akustik führen kann [23, 59]. Neben der Fluktuation des Gemischmassenstroms können die Druckschwingungen in der Vormischstrecke die Mischungsprozesse verändern und die Zufuhr von Brennstoff und Luft dahingehend beeinflussen, dass eine periodische Äquivalenzverhältnisschwankung auftritt, die in der Reaktionszone wiederum eine fluktuierende Wärmefreisetzung zur Folge hat [74]. Bei der Verbrennung von flüssigen Brennstoffen können die akustischen Druckschwingungen die Form des Sprays, die Verdampfung und die allgemeinen Mischungsvorgänge beeinflussen und hierdurch eine Massenstrom- oder Äquivalenzverhältnisschwankung hervorrufen, die ebenfalls in einer akustischen Anregung enden kann [23, 59]. Die akustischen Druckschwingungen können bei vorgemischten Flammen zu einer Beeinflussung der Flammenbewegung führen und somit eine Veränderung der Flammenfläche hervorrufen, die eine verstärkte akustische Quelle darstellt [18]. Durch die großskaligen Wirbelstrukturen, welche in turbulenten Verbrennungssystemen oft bei der Flammenstabilisierung entstehen, werden die in der Wirbelstruktur transportierten reaktionsfähigen Gemischpakete mit der Durchmischung von heißen Abgasen gezündet und es kommt zu einer rapiden Wärmefreisetzung, aus der eine starke akustische Druckschwankung resultiert [48, 100]. Wichtig zu erwähnen ist, dass die genannten Beeinflussungsmechanismen nicht automatisch zu einer thermoakustischen Instabilität führen, sondern eine Kombination aus mehreren Einflussfaktoren die Entstehung der Instabilität hervorrufen. In stationären Gasturbinen lassen sich die auftretenden thermoakustischen Instabilitäten grob in drei Frequenzbereiche einteilen [68]. Im ersten bzw. unteren Frequenzbereich bis ca. 50Hz (engl. *Low-Frequency Dynamics*, kurz LFD) treten vornehmlich Helmholtzschwingungen auf, die durch die unterschiedlichen geometrischen Abmaße von Zuführungen und den hiermit variierenden Impedanzen zusammenhängen. Im mittleren Frequenzbereich zwischen $50 - 1000\text{Hz}$ (engl. *Intermediate-Frequency Dynamics*, kurz IFD) befindet sich der Bereich, in dem die direkten und indirekte turbulenten Verbrennungslärmquellen befinden und das Verbrennungssystem zu Schwingungen anregen. Im mittleren Bereich befinden sich die Systemeigenfrequenzen von Gasturbinenbrennkammern, die typischerweise nach Bauform und Betriebstemperatur zwischen $50 - 300\text{Hz}$ liegen [68]. Oberhalb von 1000Hz liegt der hochfrequente Schwingungsbereich (engl. *High-Frequency Dynamics*, kurz HFD) der durch dreidimensionale akustische Schwingungsmoden klassifiziert ist.

Kapitel 5

Numerische Methoden

In diesem Kapitel werden die für die Strömungs- und die Akustiksimulation verwendeten numerischen Methoden vorgestellt. Sowohl die strömungsmechanischen Gleichungen die in Kapitel 2.1 vorgestellt wurden als auch die für die akustische Berechnung verwendeten linearisierten Eulergleichungen aus Kapitel 4.2.2 lassen sich für technische Verbrennungssysteme nicht analytisch lösen. Aus diesem Grund wurden zahlreiche numerische Verfahren entwickelt, die eine numerische Berechnung der zugrundeliegenden Gleichungen näherungsweise ermöglichen. Hierzu wird die Geometrie des Problemgebietes durch das numerische Gitter in viele kleine Teilgebiete zerlegt und die mathematischen Gleichungen, welche zur Lösung des Problems verwendet werden sollen, einer räumlichen und zeitlichen Diskretisierung unterzogen, um eine Lösung des Problems in Abhängigkeit von seinen Randbedingungen zu approximieren. In dieser Arbeit wurde eine hybride LES/CAA-Methodik verwendet, um die akustischen Eigenschaften eines Verbrennungssystems simulieren zu können. Hierzu wurden ein Programm aus dem Bereich der Strömungssimulation mit einem Programm aus der Akustiksimulation gekoppelt, so dass eine simultane Berechnung des reagierenden Strömungsfeldes mit seinen akustischen Eigenschaften abgebildet werden konnte. Im Folgenden wird auf die einzelnen Programmpakete der Strömungs- und Akustiksimulation gesondert eingegangen und am Ende dieses Kapitels die verwendete Kopplung zwischen den beiden Programmteilen zu erläutern.

5.1 Numerische Strömungssimulation

Die numerische Strömungssimulation, im englischen *Computational Fluid Dynamics*, kurz CFD, beschäftigt sich mit der numerischen Berechnung von Strömungsvorgängen. Aufgrund der komplexen Strukturen in Strömungen ist eine analytische Lösung in den meisten Fällen nicht möglich. Aus diesem Grund wurden numerische Verfahren entwickelt, die eine computergestützte Berechnung der komplexen Strukturen ermöglichen. Erst mit der Entwicklung der heutigen digitalen Computer gelang die Berechnung komplexerer Strömungsvorgänge. Deswegen ist die Entwicklung der numerischen Strömungssimulation stark mit der Entwicklung der Rechen- und Speicherleistung von Computern verbunden. Im Zuge der weiter fortschreitenden Computertechnologie wurden auch die numerischen Methoden weiterentwickelt, mit denen es möglich ist, selbst komplizierte technische Strömungen abbilden zu können. Dennoch ist es selbst mit der heutigen Rechen- und Speicherleistung von modernen Hochleistungsrechner nicht ohne erheblichen Aufwand und Kosten möglich, komplizierte Strömungen komplett zu berechnen. Es müssen immer noch vereinfachende Annahmen getroffen werden, um technisch relevante Strömungen und im besonderen tech-

nische Verbrennungssysteme mit vertretbarem Aufwand berechnen zu können. Trotz der genannten bestehenden Probleme kommt der Bereich der numerischen Berechnungsverfahren verstärkt zum Einsatz und ist besonders im Bereich der Verbrennungssimulation mittlerweile essentiell. Mit der numerischen Strömungssimulation lassen sich heute technische Probleme effizient und kostengünstig lösen. In einigen Bereichen ist die komplette Systemauslegung oder -überwachung auf numerische Methoden gestützt, weil die erforderlichen Systemdaten experimentell nicht zu erlangen sind oder der erforderliche Aufwand nicht zu vertreten ist. In vielen technischen Bereichen wird die numerische Strömungssimulation vor allem wegen den vergleichsweise geringen Kosten eingesetzt. Für Ingenieure und Wissenschaftler stellt sie außerdem eine hervorragende Möglichkeit zur Überprüfung und Absicherung, sowie zur Optimierung von technischen Systemen bereit. Das generelle Vorgehen bei der numerischen Strömungssimulation ist, dass die mathematischen Modelle, die dem Strömungsproblem zu Grunde liegen, meist bestehend aus mehrdimensionalen Systemen von partiellen Differentialgleichungen inklusive der beschreibenden Randbedingungen mittels geeigneter Diskretisierungsmethoden approximiert werden. Hierzu wird das Problemgebiet vorher mittels eines virtuellen Gitters (*Grid*) in viele kleine geometrie- und strömungsabhängige diskrete Gebiete unterteilt. Durch die Approximationen werden die Strömungsgrößen an den, durch das Gitter definierten, diskreten Stellen in Raum und Zeit durch ein System von algebraischen Gleichungen angenähert [87]. Für die numerische Strömungssimulation muss das zu berechnende Gebiet mit seinen Randbedingungen und die zur Beschreibung der Strömungsbewegung geeigneten mathematischen Modellen bekannt sein. Die geeigneten mathematischen Modelle müssen in der Lage sein, die zu berechnende Strömungsform abbilden zu können. Im Rahmen dieser Arbeit kann nicht auf alle Methoden eingegangen werden die in der numerischen Strömungssimulation ihre Anwendung finden, weshalb nur die speziell in dieser Arbeit verwendeten Methoden im nachfolgenden vorgestellt werden.

In der vorliegenden Arbeit wurde die numerische Strömungssimulation mit Hilfe des In-House CFD Programms PRECISE-UNS (engl. *Predictive-System for Real Engine Combustors with Improved Sub-models and Efficiency -Unstructured*, kurz PRECISE-UNS) der Firma Rolls-Royce berechnet. PRECISE-UNS ist in der Programmiersprache FORTRAN geschrieben und verwendet zur Approximation der partiellen Differentialgleichungssysteme die finite-Volumen Methode (FVM), auf die im Folgenden näher eingegangen wird. Bei der finiten Volumen Methode wird das zu berechnende Problemgebiet in kleine finite Kontrollvolumen (KV) diskretisiert und innerhalb jedes Volumens ein System von partiellen Differentialgleichungen gelöst. Um diese Berechnungen bei komplexen, großen Geometrien möglichst schnell durchführen zu können, werden die diskretisierten finiten Volumen anteilig, mittels einer Gebietszerlegung, auf die zur Berechnung vorhandenen Prozessoren aufgeteilt und somit eine effiziente Parallelisierung vorgenommen. Die Informationen zwischen den einzelnen aufgeteilten Gebieten bzw. Prozessoren werden mit Hilfe der MPI-Schnittstelle [41] (engl. *Message Passing Interface*, kurz MPI) ausgetauscht. PRECISE-UNS basiert auf unstrukturierten numerischen Gittern was besonders für die Berechnung von komplexen Geometrien sehr vorteilhaft ist. Zur Lösung der erhaltenen Gleichungssysteme stehen in PRECISE-UNS eine Vielzahl von kommerziellen und frei verfügbaren Lösungsalgorithmen zur Verfügung. Eine detaillierte Übersicht über die in PRECISE-UNS verwendeten Methoden ist in [2] zu finden.

5.1.1 Räumliche Diskretisierung

Bei der numerischen Strömungssimulation werden im allgemeinen die Navier-Stokes-Gleichungen, wie sie in Kapitel 2.1 vorgestellt wurden, in allgemeiner oder modifizierter Form verwendet. Diese haben eine ähnliche Struktur wie die allgemeine generische Erhaltungsgleichung (5.1) für einen Skalar ϕ , der alle Variablen wiedergeben kann:

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \phi}{\partial t}}_{(I)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \phi u_j)}_{(II)} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right)}_{(III)} + \underbrace{\dot{\omega}_\phi}_{(IV)}. \quad (5.1)$$

Die generische Erhaltungsgleichung (5.1) besteht aus einem instationären Anteil (I), den konvektiven- (II) und diffusiven Flüssen (III) sowie einem Quellterm (IV). Anhand dieser generischen Erhaltungsgleichung soll die allgemeine Vorgehensweise bei der numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen gezeigt werden. Auf die speziellen Eigenschaften der Navier-Stokes Gleichungen wird im Verlauf dieses Kapitels näher eingegangen. In dieser Arbeit wird, wie anfangs erwähnt, zur Diskretisierung des Problemgebietes eine finite-Volumen Methode eingesetzt. Die FVM ist in der numerischen Strömungssimulation die bevorzugte räumliche Diskretisierungsmethode. Sie besitzt, im Vergleich zur später bei der Akustiksimulation verwendeten finiten-Differenzen Methode (FDM), klare Vorteile bei der Gitterwahl und stellt mathematisch eine konservative Formulierung zur Verfügung. Die Konservativität besagt, dass die Eigenschaften von kontinuierlichen Systemen auch in ihren diskretisierten Systemen erhalten bleibt. Das bedeutet, dass die numerischen Verfahren bei Verwendung von Erhaltungsgesetzen diese im gesamten Problemgebiet erfüllen müssen, sodass die lokalen und globalen Bilanzen der Erhaltungsgrößen gewährleistet sind. Um die Konservativität sicher zu stellen, werden die beschreibenden Gleichungen in integraler Form vorausgesetzt:

$$\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \int_V \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \phi u_j) dV = \int_V \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) dV + \int_V \dot{\omega} dV. \quad (5.2)$$

Mit Hilfe des Gaußschen Integralsatzes:

$$\int_V \frac{\partial F_i}{\partial x_i} = \int_S F_i n_i dS, \quad (5.3)$$

können die Volumenintegrale der konvektiven- und diffusiven Flüsse in Oberflächenintegrale überführt werden. In Definition (5.3) bezeichnet n_i den Einheitsvektor, der senkrecht auf der zugehörigen Kontrollvolumenoberfläche S steht. Die Volumenintegral werden nach der Anwendung des Gaußschen Integralsatzes über eine Bilanz aus den Oberflächenintegralen der einzelnen KV-Seiten S_c dargestellt:

$$\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \sum_c \int_{S_c} (\rho u_j n_j \phi) dS_c = \sum_c \int_{S_c} \left(\rho D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j \right) dS_c + \int_V \dot{\omega} dV. \quad (5.4)$$

Bei der FVM werden die Rechenpunkte üblicherweise in das Zentrum P der Kontrollvolumen gesetzt und die Diskretisierung erfolgt über die Ränder der einzelnen KV's. Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 5.1 ein 2-dimensionales FVM Gitter, mit seinen nach

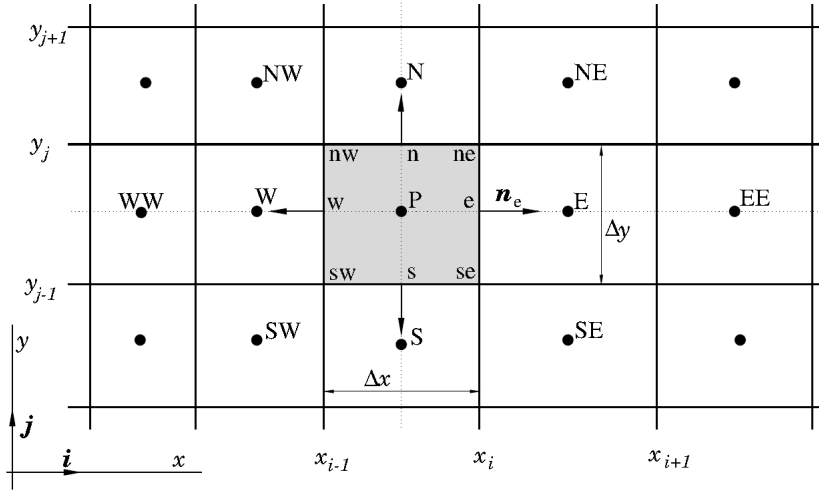


Abbildung 5.1: 2-dimensionales FVM-Gitter mit Kompassnotation der KV-Ränder [87, S.85]

den Himmelsrichtungen benannten Seitenflächen, dargestellt:

Zur Approximation der Gleichung (5.4) muss prinzipiell zwischen der Approximation von Oberflächen- und Volumenintegralen unterschieden werden. In PRECISE-UNS kommt zur Approximation der beiden Integraltypen die Mittelpunktsregel zum Einsatz. Die Mittelpunktsregel ist eine offene Newton-Cotes-Formel und besitzt eine Genauigkeit 2. Ordnung, wenn der Integrand ebenfalls eine Genauigkeit 2. Ordnung hat. Bei den Oberflächenintegralen wird der Mittelwert der Variablen im Flächenschwerpunkt c der Seite zur Approximation der Flüsse durch die KV-Seite verwendet. Bei der Betrachtung der Volumenintegrale wird die Annahme getroffen, dass der Wert im Mittelpunkt des KV, d.h. in P , einen Mittelwert des KV darstellt. Mit diesen Voraussetzungen ergibt sich die Gleichung (5.4) in ihrer approximierten Formulierung zu:

$$\left. \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right|_P \Delta V + \sum_c (\rho u_j n_j \phi)|_c S_c = \sum_c \left(\rho D \frac{\partial \phi}{\partial x_j} n_j \right) \Big|_c S_c + \dot{\omega}|_P \Delta V. \quad (5.5)$$

5.1.2 Interpolationsverfahren

Die Interpolation der Variablenwerte ist notwendig, weil durch die Approximation der Oberflächenintegrale mit der Mittelpunktsregel die Werte der Variablen auf den KV-Seiten benötigt werden. Bei der Interpolation wird zwischen den konvektiven- und diffusiven Flüssen unterschieden. Bei den konvektiven Flüssen wird der Wert der Variablen und bei den diffusiven Flüssen die Ableitung der Variablen im KV Flächenschwerpunkt benötigt [87]. Es gibt zahlreiche Methoden zur Interpolation der Randwerte, wovon hier nur die verwendeten Methoden kurz beschrieben werden sollen.

Diskretisierung der konvektiven Flüsse

Zur Diskretisierung der konvektiven Flüsse werden die Variablenwerte ϕ in den Integrationspunkten auf den KV-Rändern benötigt:

$$\sum_c (\rho u_j n_j \phi)|_c S_c = \sum_c \dot{m} \phi|_c \quad (5.6)$$

Diese sind auf den KV-Rändern nicht bekannt und müssen durch eine Interpolation mit den benachbarten Werten der KV-Zentren berechnet werden. Die Herleitung der einzelnen Interpolationsverfahren soll in Anlehnung an Abbildung 5.1 auf einem kartesischen Gitter an der Ostseite e durchgeführt werden.

Zentraldifferenzen-Verfahren (CDS)

Das Zentraldifferenzen-Verfahren (*Central Differencing Scheme*, kurz CDS) gibt eine lineare Interpolation an. Sie verwendet die Werte aus den direkt benachbarten KV-Zentren ϕ_E und ϕ_P um den Wert ϕ_e auf dem dazwischen liegenden KV-Rand zu interpolieren:

$$\phi_e \approx \phi_E \lambda_e + \phi_P (1 - \lambda_e), \quad (5.7)$$

worin der lineare Interpolationsfaktor λ_e über die Abstände der benachbarten KV-Zentren zum KV-Rand definiert ist:

$$\lambda_e = \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P}. \quad (5.8)$$

Die Approximation von ϕ_e durch die Gleichung (5.7) hat, wie man durch eine Taylorreihenentwicklung zeigen kann, eine Genauigkeit 2. Ordnung. Infolge dieser Bedingung neigt das Verfahren zu oszillierenden Lösungen. Werden zur Approximation zusätzliche Gitterpunkte verwendet, lassen sich CDS-Verfahren höherer Ordnung herleiten. PRECISE-UNS kann mit unstrukturierten Gittern arbeiten, was oft zu schiefen Kontrollvolumen führt. Um die Ordnung des Verfahrens zu gewährleisten, wird eine Gradienten basierende Korrektur durchgeführt.

Upwind-Verfahren (UDS)

Bei den Upwind-Verfahren (*Upwind-Differencing-Scheme* (UDS)) ist die Interpolation von ϕ_e auf dem KV-Rand von der Strömungsrichtung abhängig.

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{für } (u \cdot n)_e > 0 \\ \phi_E & \text{für } (u \cdot n)_e < 0 \end{cases} \quad (5.9)$$

Die Upwind-Verfahren erfüllen als einzige Interpolationsverfahren die vollständige Beschränktheit und erzeugen deswegen auch keine oszillierenden Lösungen. Dies resultiert aus einem Verfahren 1. Ordnung, weil der führende Abbruchfehler diffusiv ist. Die künstliche numerische Diffusion wird bei mehrdimensionalen schräg angeströmten Gitter verstärkt, was zu einem schwerwiegenden Fehler führen kann. Eine Reduzierung des Fehlers lässt sich durch eine Verfeinerung des Gitters erreichen [87].

Hybride-Diskretisierungs-Verfahren

Es ist prinzipiell möglich die einzelnen Verfahren zur Diskretisierung der konvektiven Flüsse miteinander zu mischen. Hieraus ergeben sich die Hybriden-Verfahren oder auch Flux-Blending-Methode. Von Spalding wurde 1972 ein Verfahren vorgeschlagen, was die UDS- und CDS-Verfahren miteinander kombiniert. Unter bestimmten Voraussetzungen ist es ratsam die Zentralknoten-Verfahren mit Upwind-Verfahren zu mischen, um die starken Oszillationen zu reduzieren. Ein weiterer Grund für die Mischung besteht darin, dass hierdurch das Konvergenzverhalten iterativer Löser verbessert werden kann [87]. Aus diesem Grund wurde in dieser Arbeit bei der Berechnung der konvektiven Flüsse der Geschwindigkeiten die Technik der verzögerten Korrektur angewendet, welche die unerwünschten numerischen Oszillationen der CDS-Methode verringert:

$$\phi_e = (\phi^{UDS})_{\text{implizit}} + (\phi_e^{CDS} - \phi_e^{UDS})_{\text{explizit}}. \quad (5.10)$$

Die Definition (5.10) besteht aus einem expliziten und einem impliziten Anteil. Der explizite Anteil gibt die Differenz der CDS- und UDS-Werte aus der letzten bekannten Lösung an und korrigiert damit den implizit gewonnenen UDS-Wert des aktuellen Wertes, der den Flächenmittelwert einer Nachbarzelle angibt.

Für die Berechnung der konvektiven Terme in den Spezies- bzw. Skalargleichungen wurde das Minmod-Verfahren nach [47] verwendet, um die numerischen Oszillationen zu vermeiden. Dieses Verfahren gehört zu der Familie der Flusslimitierer (engl. *flux limiter*). Diese Verfahren begrenzen die totale Variation eines Skalarfeldes infolge der konvektiven Flüsse. Hierzu wird das Auftreten von numerischen Oszillationen detektiert und durch Einblenden von diffusiven Verfahren niedriger Ordnung gedämpft. Die Detektion erfolgt über das für unstrukturierte Gitter entwickelte Convection Boundedness Criterion (CBC) von [55].

Diskretisierung der diffusiven Flüsse

Zur Diskretisierung der diffusiven Flüsse werden die Gradienten der Variablen ϕ in den Integrationspunkten auf den KV-Rändern benötigt. Diese können analog zu den Zentralknoten CDS bei den konvektiven Flüssen mit den benachbarten Werten aus den KV-Zentren berechnet werden. Mit der Zentralknotenformel erhält man für die Ostseite e :

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_e \approx \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} \quad (5.11)$$

Auf äquidistanten Gittern erhält man mit den Zentralknoten eine Genauigkeit 2. Ordnung. Bei nicht äquidistanten Gittern erreicht man eine Genauigkeit 1. Ordnung, die jedoch stark von den Abmessungen der benachbarten KV abhängt. Unterscheiden sich die Abmessungen der benachbarten KV's sehr stark voneinander, steigt der Fehlerterm schnell an, weil er proportional zur Gitterweite und dem Expansionsverhältnis der benachbarten KV's ist. Prinzipiell ist es auch möglich, Verfahren höherer Ordnung anzuwenden [101]. In dieser Arbeit wurde für die Interpolation der diffusiven Flüsse auf den KV-Rändern ähnlich wie bei den konvektiven Flüssen eine verzögerte Korrektur durchgeführt, wie sie von [87] vorgeschlagen wird.

5.1.3 Diskretisierungsfehler

Bei der Approximation von Differentialgleichungen entstehen bei den Diskretisierungsverfahren durch den vorzeitigen Abbruch der Tayloreihe sogenannte Abbruchfehler. Diese Abbruchfehler sind dafür verantwortlich, dass die diskretisierte Gleichung die genaue Lösung der Differentialgleichung nicht erreichen kann.

$$F(\phi) = F_{\Delta h}(\phi) + \tau_{\Delta h} \quad (5.12)$$

Hier stehen F für die genaue Lösung der Differentialgleichung, $F_{\Delta h}$ für die exakte Lösung der diskretisierten Gleichung in Form des algebraischen Gleichungssystems auf dem Gitter und mit der charakteristischen Gitterweite Δh und $\tau_{\Delta h}$ wird der Abbruchfehler oder das sogenannte Residuum angegeben. Der Diskretisierungsfehler $\epsilon_{\Delta h}$ repräsentiert die Differenz zwischen der exakten Lösung der Differentialgleichung und der exakten Lösung der diskretisierten Gleichung [87].

$$\phi = \phi_{\Delta h} + \epsilon_{\Delta h}. \quad (5.13)$$

Um den Diskretisierungsfehler zu bestimmen, müsste man nach dieser Gleichung die exakte Lösung der Differentialgleichung kennen, was normalerweise nicht der Fall ist. Für lineare Problem kann man herleiten, dass die Ursache des Diskretisierungsfehlers vom Abbruchfehler abhängt. Mit Hilfe einer Richardson-Extrapolation kann man mit den numerischen Ergebnissen aus den Berechnungen auf Gittern der Gitterweiten $4 \Delta h$, $2 \Delta h$, Δh eine Abschätzung des Diskretisierungsfehlers vornehmen. Hierbei nimmt man an, dass für eine Methode p -ter Ordnung auf hinreichend feinem Gitter die Beziehung [101]:

$$\phi = \phi_{\Delta h} + C \Delta h^p + O(\Delta h^{p+1}) \quad (5.14)$$

gilt. Hier steht C für eine vom Gitter unabhängige Konstante. Hieraus wird ersichtlich, dass der Fehler proportional zur p -ten Potenz der Gitterweite ist. Mit den Gitterweitenvariationen und der Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung ergibt sich aus einem Gleichungssystem, basierend auf der Gleichung (5.14): die Ordnung der Methode:

$$p = \frac{\log \left(\frac{\phi_{2\Delta h} - \phi_{4\Delta h}}{\phi_{\Delta h} - \phi_{2\Delta h}} \right)}{\log 2}. \quad (5.15)$$

Mit der Ordnung p und einer Abschätzung der Konstanten C lässt sich der Diskretisierungsfehler ϵ_h über:

$$\epsilon_{\Delta h} \approx \frac{\phi_{\Delta h} - \phi_{2\Delta h}}{2^p - 1} \quad (5.16)$$

abschätzen. Mit den abgeschätzten Größen kann eine gitterunabhängige und somit konvergierende Lösung angenähert werden:

$$\phi \approx \phi_{\Delta h} + \frac{\phi_{\Delta h} - \phi_{2\Delta h}}{2^p - 1}. \quad (5.17)$$

5.1.4 Zeitliche Diskretisierung

Technische Problemstellungen sind häufig von instationären Vorgängen geprägt, weshalb die instationären Terme in den beschreibenden Gleichungen ebenfalls diskretisiert werden müssen. Hierbei stellt die Zeit eine besondere Größe dar, weil sie im Gegensatz zu Ortskoordinaten nur eine Ausbreitungsrichtung hat. Aus diesem Grund handelt es sich bei den Zeitdiskretisierungsverfahren um Extrapolationsverfahren. Bei strömungsmechanischen Problemen tritt in den instationären Transportgleichungen nur die erste zeitliche Ableitung auf,

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \approx \left. \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \right|_P \Delta V = f(t, \phi(t)) \quad (5.18)$$

die ein parabolisches Problem charakterisiert. Wichtig bei der Lösung von instationären Vorgängen ist, dass neben den nun zeitabhängigen Randbedingungen, die das Problem beschreiben, auch Anfangsbedingungen nötig sind. Nach der räumlichen Diskretisierung des Problemgebietes wird das zu berechnende Zeitintervall $[t_{start}, t_{Ende}]$ über die definierte Zeitschrittweite Δt in einzelne Teilintervalle $[n = 0, 1, 2, \dots, N]$ zerlegt, so dass für jede Zeitebene die Variablenwerte berechnet werden können:

$$t^{n+1} = t^n + \Delta t. \quad (5.19)$$

Für die zeitliche Diskretisierung sind zahlreiche Verfahren vorhanden, die sich grob in Ein- oder Mehrschrittverfahren und Prädiktor-Korrektur-Verfahren gliedern lassen. Bei den Einzschrittverfahren oder auch Zwei-Ebenen-Methoden werden zur Extrapolation der Werte der zukünftigen Zeitebene lediglich die Werte einer vergangenen Zeitebene verwendet, während bei den Mehrschrittverfahren oder Mehrpunktmethoden Werte von mehreren zurückliegenden Zeitebenen für die Extrapolation genutzt werden. Bei den Prädiktor-Korrektur-Verfahren werden die einzelnen vorher genannten Verfahren in mehreren Berechnungsschritten miteinander gemischt [87]. Zur Lösung des instationären Terms in der Gleichung (5.5) wurde in dieser Arbeit ein implizites Zeitschrittverfahren verwendet. Bei den impliziten Verfahren wird der instationäre Term auf die linke Seite des Gleichungssystems gebracht, womit alle Größen auf der rechten Seite einem bestimmten Zeitschritt zugeordnet werden können. Die impliziten Verfahren nutzen zur Berechnung der neuen Zeitebene neben den bekannten Zeitebenen auch die neue Zeitebene, weshalb man zur Lösung der neuen Zeitpunkte ein nichtlineares Gleichungssystem lösen muss. Auf Grund dieser Bedingung benötigen die impliziten Verfahren mehr Speicher und Rechenleistung als explizite Verfahren. Sie sind aber im Gegensatz zu den expliziten Zeitschrittverfahren nicht an die Stabilitätsbedingung der CFL-Zahl geknüpft und deswegen im allgemeinen stabiler als explizite Verfahren. Das bekannteste implizite Verfahren, ist das implizit Euler-Verfahren oder auch Rückwärts-Euler-Verfahren. Die Bezeichnung Rückwärts-Euler-Verfahren leitet sich davon ab, dass es durch die Approximation der Zeitableitung zum Zeitpunkt t^{n+1} mittels einer Rückwärtsdifferenzenformel gebildet wird:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}(t^{n+1}) \approx \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = RHS(\phi^{n+1}) \quad (5.20)$$

Hieraus ist ersichtlich, dass die Umstellung der Gleichung für den neuen Zeitpunkt ϕ^{n+1} nicht mehr möglich ist, weil eine Kopplung vorliegt. Zur Lösung des neuen Zeitpunktes

muss deswegen ein Gleichungssystem gelöst werden. Das implizite Euler-Verfahren besitzt ebenso wie das explizite Verfahren eine Genauigkeit von 1. Ordnung in der Zeitdiskretisierung. Wegen der nicht vorhandenen Beschränkung der Zeitschrittweiten ist das implizite Verfahren effizienter als das explizite. Das algebraische Gleichungssystem, das sich aus einem, nach dem implizit Euler-Verfahren berechneten stationären Transportvorgang ergibt, hat im Vergleich zum stationären Transportvorgang lediglich zwei zusätzliche Terme in der beschreibenden Koeffizientenmatrix, d. h. dass sich für den Grenzfall der unendlichen Zeitschrittweite $\Delta t \rightarrow \infty$ ein stationäres algebraisches Gleichungssystem ergibt. Neben dem vorgestellten impliziten Einschrittverfahren ist in PRECISE-UNS ein implizites 3-Ebenen-Mehrschrittverfahren implementiert, welches in dieser Arbeit verwendet wurde. Hierbei werden die letzten beiden zurückliegenden Zeitschritte zur Berechnung des aktuellen Zeitschrittes verwendet und somit eine Genauigkeit 2. Ordnung erzielt [87] :

$$\left. \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \right|_P \Delta V = \frac{3\rho\phi|_P^{n+1} - 4\rho\phi|_P^n + \rho\phi|_P^{n-1}}{2 \Delta t} \Delta V = RHS(\phi^{n+1}) \quad (5.21)$$

5.1.5 Druck-Korrektur-Verfahren

In der vorliegenden Arbeit wurde zur Berechnung des reagierenden Strömungsfeldes eine Low-Mach Annahme getroffen und die allgemeinen Navier-Stokes-Gleichungen, wie sie in Kapitel 2.1 vorgestellt wurden, in ihrer inkompressiblen Formulierung verwendet. Hierbei besteht das Problem, dass die Geschwindigkeiten u_i und der Druck p als unbekannte Größen in den Impulsgleichungen auftreten, die Kontinuitätsgleichung keinen Druckterm beinhaltet und somit keine unabhängige Gleichung für den Druck vorhanden ist. Zur Lösung des Problems haben sich Prädiktor-Korrektur Verfahren etabliert, die sukzessive über einen geschätzten Druck das Geschwindigkeitsfeld anpassen. Aufgrund der Nichtlinearitäten der allgemeinen Navier-Stokes-Gleichungen ergibt sich nach der Diskretisierung ein nichtlineares gekoppeltes algebraisches Gleichungssystem, das mit iterativen Methoden gelöst werden muss. Durch die iterative Lösung des Gleichungssystems ist die Erhaltung der Masse von einer zur nächsten Iteration nicht zwingend gewährleistet. PRECISE-UNS ist ein druckbasierender CFD-Code, der zur Korrektur des Fehlers eine Druck-Korrektur-Methode verwendet, die als SIMPLE-Algorithmus (*Semi-Implizit-Methode-of-Pressure-Linked-Equations*) bekannt ist. Über den SIMPLE-Algorithmus wird das Geschwindigkeitsfeld durch eine Korrektur des Druckfeldes korrigiert, so dass die Massenerhaltung im gesamten Lösungsgebiet erfüllt ist. Dieser Prozeß erfolgt nach jeder äußeren Iteration, bis der Betrag der Korrektur eine definierte Grenze (Residuum) erreicht hat. Schreibt man den Druckgradiententerm in der linearisierten algebraischen Impulserhaltungsgleichung explizit aus, erhält man für eine äußere Iteration die Gleichung:

$$A_P^{u_i} u_{i,P}^{m*} + \sum_l A_l^{u_i} u_{i,l}^{m*} = B_{u_i}^{m-1} - \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} \right)_P^{m-1}. \quad (5.22)$$

Hier steht m für die m -te äußere Iteration und $(*)$ bezeichnet die vorläufige Lösung, die noch korrigiert werden muss. Aus Gleichung (5.22) ist ersichtlich, dass die Berechnung der Geschwindigkeiten mit bekannten Werten aus der vorherigen äußeren Iteration vorgenommen wurde, weshalb die Massenerhaltung in den einzelnen Kontrollvolumen nicht gewährleistet sein kann. Aus diesem Grund muss das Geschwindigkeitsfeld korrigiert werden. Um

die Korrekturen zu erhalten, werden bei der SIMPLE-Methode zu den vorläufigen Werten der Geschwindigkeiten u^{m*} und des Druckes p^{m-1} aus Gleichung (5.22) die zu berechnenden Korrekturen u'_K und p'_K addiert, so dass sich die korrigierten Geschwindigkeiten und Drücke ergeben:

$$u_i^m = u_i^{m*} + u'_K \quad \text{und} \quad p^m = p^{m-1} + p'_K. \quad (5.23)$$

Mit der Subtraktion der Gleichung (5.22) mit den korrigierten Versionen aus Gleichung (5.23) erhält man eine Gleichung (5.24) für die Geschwindigkeitskorrektur die mit der Druckkorrektur gekoppelt ist. In diesem Zusammenhang spricht man auch von einer Druck-Geschwindigkeits-Kopplung:

$$u'_{K,i,P} = -\frac{V_P \sum_l A_l^{u_i} u'_{K,i,l}}{A_P^{u_i}} - \frac{1}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\partial p'_K}{\partial x_i} \right)_P. \quad (5.24)$$

Setzt man voraus, dass die korrigierten Geschwindigkeiten aus Gleichung (5.23) die diskretisierte Massenerhaltungsgleichung $\frac{\delta(\rho u_i^m)}{\delta x_i} = 0$ erfüllen, erhält man durch die Beschreibung der Geschwindigkeitskorrektur u'_i als Druckkorrektur, mit Hilfe der Druck-Geschwindigkeits-Kopplung aus Gleichung (5.24), die folgende Druckkorrekturgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\rho}{A_P^{u_i}} \left(\frac{\partial p'_K}{\partial x_i} \right) \right]_P = \left[\frac{\partial(\rho u_i^{m*})}{\delta x_i} \right]_P + \left[\frac{\partial(\rho \tilde{u}'_{K,i})}{\partial x_i} \right]_P. \quad (5.25)$$

In Gleichung (5.25) gibt $\tilde{u}'_{K,i}$ die Abkürzung für den ersten Term in Gleichung (5.24) an. Bei der SIMPLE-Methode werden diese Geschwindigkeitskorrekturen an den Kontrollvolumenoberflächen vernachlässigt, was zu einer erschwerten Konvergenz der Methode führen kann. Es existieren drei weitere bekannte Methoden die auf der vorgestellten SIMPLE-Methode basieren. In diesen Methoden wird eine Approximation des letzten vernachlässigten Terms in der Druckkorrekturgleichung (5.25) vorgenommen, um die Konvergenzprobleme zu beseitigen [87]. Die Methoden heißen:

1. SIMPLEC-Algorithmus
2. PISO-Algorithmus
3. SIMPLER-Algorithmus

Führt man jedoch bei der SIMPLE-Methode eine Art der Unterrelaxation für die Druckkorrektur ein, führt dies zu einer besseren Konvergenzrate. Nach der Lösung der Druckkorrekturgleichung (5.25) lassen sich der Druck, die Geschwindigkeiten und die Massenströme wie folgt aktualisieren:

$$p^m = p^{m-1} + \gamma_p p'_K \quad 0 \leq \gamma_p \leq 1, \quad (5.26)$$

$$u_i^m = u_i^{m-1} - \frac{V_P}{A_P} \left(\frac{dp'_K}{dx_i} \right)_P, \quad (5.27)$$

$$\dot{m}_i^m = \dot{m}_i^{m-1} + \dot{m}'_{K,i} \quad \dot{m}'_{K,i} = \frac{\rho S_i^2}{A_P} (p'_{K,l} - p'_{K,P}). \quad (5.28)$$

Die vorgestellte SIMPLE-Methode lässt sich bis zu einer Machzahl $Ma < 0,5$ verwenden. Weiterführende Informationen zu den Druck-Korrektur-Verfahren, sowie deren Behandlung bei unstrukturierten Gittern sind in [87] zu finden.

5.1.6 Numerisches Gesamtverfahren

Für die vollständige Lösung der vorgestellten diskretisierten Gleichungssysteme sind Anfangs- und Randbedingungen notwendig. Ohne die Angabe der Anfangs- und Randbedingungen kann keine Lösung für ein spezifisches Problem berechnet werden. Hierbei repräsentieren die Randbedingungen die geometrischen Begrenzungen des zu berechnenden Problemgebietes, während die Anfangsbedingungen die spezifischen zeitlichen Eintrittsbedingungen in das Problemgebiet wiedergeben.

In dieser Arbeit wurden 3 Arten von Randbedingungen verwendet. Für die physikalischen Wände der Problemgebiete wurde die häufig verwendete Haftbedingung vorausgesetzt, die numerisch für die Geschwindigkeiten mit Hilfe einer Dirichlet-Randbedingung diese zu Null setzt und den Skalartransport in Wandnormalenrichtung über eine Null-Gradientenbeziehung, eine sogenannte Neumann-Bedingung, ebenfalls eliminiert:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_i} n_i = 0. \quad (5.29)$$

An den Eintrittsflächen werden die Werte der Variablen nach der Dirichlet-Randbedingung explizit vorgegeben. Für die Austrittsfläche wird wiederum eine Null-Gradientenbeziehung verwendet. Zur Beschleunigung der Konvergenz der Druck-Korrektur Methode und somit zur Sicherstellung der Massenerhaltung wird eine Skalierung des Eintrittsmassenstroms multipliziert mit der internen zeitlichen Änderung der Masse durch den Term $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ und dem Austrittsmassenstrom vorgenommen. Die Anfangsbedingungen zum Zeitpunkt $t = 0$ sind von der zu berechnenden Konfiguration abhängig und sollten so gewählt werden, dass sie im Idealfall eine sehr gute Näherung des zu erwartenden quasi-stationären Strömungszustandes sind. Diese Forderung ist bei komplexen Problemstellungen nur sehr schwer erfüllbar.

5.2 Numerische Akustiksimulation

Die numerische Akustiksimulation, im englischen *Computational Aeroacoustic*, kurz CAA, beschäftigt sich mit der numerischen Berechnung von akustischen Wellen und deren Ausbreitung. Wie bei der Berechnung von Strömungen ist es im Bereich der Akustik schwierig analytische Berechnungen für komplexe Geometrien durchzuführen. Aus diesem Grund wurden numerische Verfahren entwickelt, die eine computergestützte Berechnung der komplexen Ausbreitungsmechanismen von akustischen Wellen berechnen können. Hierzu wurden die aus der numerischen Strömungssimulation bekannten Methoden weiterentwickelt und auf die Anwendung in der Akustik angepasst. Die mathematischen Gleichungen mit denen eine akustischen Wellenausbreitung berechnet werden kann, stellen im Vergleich zu denen, die in der Strömungssimulation verwendet werden, eine deutliche Vereinfachung dar. Hier liegt die Schwierigkeit eher in der exakten numerischen Behandlung der Gleichungen, die aufgrund der, im Vergleich zu den Fluidströmungen, sehr schnellen Ausbreitungsgeschwindigkeiten einer besonderen Bedeutung zukommt. Bei der akustischen Wellenausbreitung kommt es sehr stark auf die Dispersions- und Dissipationseigenschaften der numerischen Methoden an, damit die teils sehr schnellen und betragsmäßig kleinen Wellenamplituden möglichst ohne numerische Verluste transportiert werden können. Diese Problematik ist als Multiskalenproblem bekannt und repräsentiert die Disparität der

Energie, der unterschiedlichen Längen- und Zeitskalen. Hierbei bewirken bei der numerischen Berechnung disperse numerische Verluste einen Phasenversatz, wohingegen eine starke numerische Dissipation die Wellenamplituden betragsmäßig reduziert. Um diese Berechnungen effizient und exakt durchführen zu können müssen numerischen Diskretisierungsverfahren mit höheren Ordnungen bzw. Genauigkeiten angewendet werden, als dies bei der numerische Strömungssimulation notwendig ist.

Für die numerische Akustiksimulation in dieser Arbeit wurde das akademische CAA Programm PIANO (engl. *Perturbation Investigation of Aerodynamic Noise*, kurz PIANO) verwendet, welches vom Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) entwickelt wurde und im Folgenden näher erläutert wird. Das numerische Gitter in PIANO basiert auf einem krummlinigen-block-strukturierten numerischen Gitter, welches die Problemgeometrie in mehrere geometrische Blöcke aufteilt. Hierdurch wird in PIANO die Parallelisierung mittels, der ebenfalls von PRECISE-UNS verwendeten, MPI-Schnittstelle vorgenommen, indem die einzelnen Blöcke auf die zur Berechnung verwendeten Prozessoren aufgeteilt werden. PIANO stellt numerische Verfahren hoher Ordnungen bereit und unterstützt die Berechnung von komplexen Geometrien. Für die akustischen Berechnungen stehen mehrere Varianten der akustischen Störgleichungen (APE), sowie die linearisierten Eulergleichungen (LEE) zur Verfügung, wovon letztere in Kapitel 4.2.2 hergeleitet wurden und zur Berechnung in dieser Arbeit verwendet wurden.

5.2.1 Räumliche Diskretisierung

Die räumliche Diskretisierung von PIANO basiert auf einer finiten-Differenz Methode (FDM). Bei der FDM werden die beschreibenden partiellen Erhaltungsgleichungen in differentieller Form in jedem Gitterpunkt approximiert. Die Approximationen für die partiellen räumlichen Ableitungen in den beschreibenden Gleichungen erhält man meist aus einer Taylorreihenentwicklung oder einem Polynomansatz, womit die Ableitung durch Differenzenquotienten zwischen benachbarten Gitter- oder Knotenpunkten ersetzt werden. Hieraus erhält man eine algebraische Gleichung für jeden approximierten Gitterpunkt die den Variablenwert im Gitterpunkt sowie die zur Approximation verwendeten Werte der Nachbarpunkte als Unbekannte enthält. Die FDM ist besonders für strukturierte Gitter, wie beispielsweise in Abbildung 5.2 dargestellt, geeignet und dort einfach und effektiv anwendbar, obwohl sie auf jedem Gittertyp anwendbar wäre. Das Grundkonzept der FDM sieht vor, dass jeder Gitterpunkt als Basis eines lokalen Koordinatensystems dient und die einzelnen Terme in den Erhaltungsgleichungen in jedem Gitterpunkt approximiert werden, um ein lineares algebraisches Gleichungssystem für jeden Gitterpunkt zu erhalten. Die Lösung des linearen algebraischen Gleichungssystem gibt die Approximation der partiellen Erhaltungsgleichungen an [87]. Um die, eingangs erwähnten, Dispersions- und Dissipationsfehler möglichst zu verhindern, wird in PIANO zur räumlichen Diskretisierung das, speziell für FD-Verfahren hoher Ordnung entwickelte, Dispersion-Relation-Preserving Scheme (DRP) [118] eingesetzt. Mit dem DRP-Verfahren kann auf einem äquidistanten Gitter mit der Gitterweite Δx für einen Rechenstern von sieben Punkten theoretisch für die Approximation der räumlichen Gradienten ein Verfahren sechster Ordnung hergeleitet

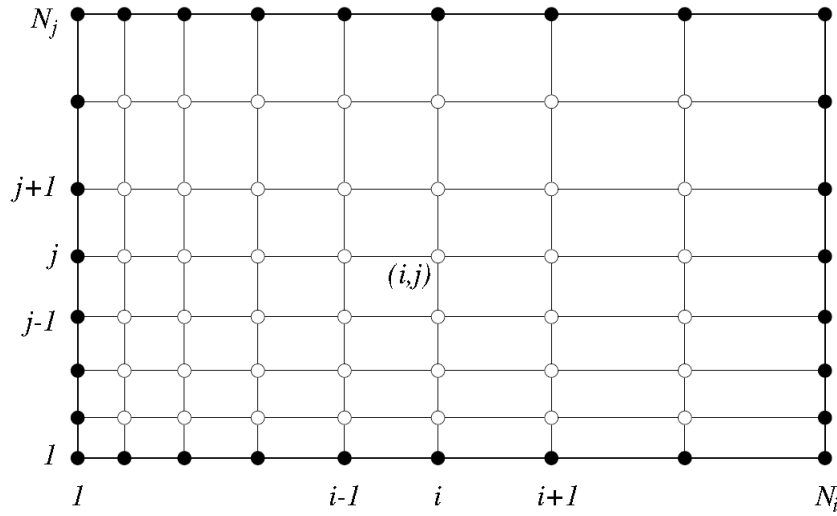


Abbildung 5.2: Beispiel für ein 2-dimensionales FDM-Gitter [87, S.48]

werden:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i = \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=-3}^{j=3} c_j \phi_{i+j} \quad (5.30)$$

Aufgrund der Minimierung des Dispersionsfehlers wurden die Koeffizienten des Verfahren angepasst, womit das DRP-Verfahren in PIANO praktisch ein Verfahren vierter Ordnung ist. Bei der räumlichen Diskretisierung des Rechengebietes muss darauf geachtet werden, dass die relevanten akustischen Wellenlängen durch das numerische Gitter aufgelöst werden können.

5.2.2 Zeitliche Diskretisierung

Die Ausbreitung von akustischen Wellen ist ein zeitabhängiger Prozess. Um die Wellenausbreitung mit hoher zeitlicher Genauigkeit und Effizienz beschreiben zu können, werden in PIANO, analog zu den hohen räumlichen Diskretisierungsverfahren, für die zeitliche Diskretisierung ebenfalls spezielle Verfahren hoher Ordnung angewendet. In PIANO wird der zeitliche Fortschritt durch ein mehrstufiges, explizites Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung approximiert. In dieser Arbeit wurde für die Approximation des instationären Terms, das von [50] vorgeschlagene LDDRK-Verfahren (engl. *Low Dissipation and Dispersion Runge Kutta Scheme*, kurz LDDRK) verwendet. Bei diesem speziellen fünf bzw. sechstufigen Runge-Kutta Verfahren wurden, wie der Name schon vermuten lässt, die Koeffizienten angepasst, um eine Minimierung der Dispersions- und Dissipationsfehler zu erreichen. Bei dem expliziten Verfahren werden die instationären Terme auf die linke Seite gebracht:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = RHS(\phi) \quad (5.31)$$

Für das klassische explizite, vierstufige Runge-Kutta Verfahren erhält man die Werte zum neuen Zeitschritt $t^{(n+1)}$ über:

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t \sum_{i=1}^{i=4} a_i K_i \quad (5.32)$$

Die Koeffizienten der Teilschrittweiten a_i sowie für die vier einzelnen Stufen K_i sind:

$$a_1 = \frac{1}{6}, \quad a_2 = \frac{1}{3}, \quad a_3 = \frac{1}{3}, \quad a_4 = \frac{1}{6} \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} K_1 &= RHS(\phi) \\ K_2 &= RHS(\phi + \frac{1}{2}\Delta t K_1) \\ K_3 &= RHS(\phi + \frac{1}{2}\Delta t K_2) \\ K_4 &= RHS(\phi + \Delta t K_3) \end{aligned} \quad (5.34)$$

Um die Lösung zum neuen Zeitschritt $t^{(n+1)}$ zu erhalten, wird innerhalb eines Zeitschrittes Δt , bei dem alternierenden LDDRK-Verfahren eine fünf bzw. teilweise sechs stufige Berechnung durchgeführt:

$$\phi^{n+1} = \phi^n + K_p \quad (p = 1, \dots, 5, 6) \quad (5.35)$$

In Definition (5.35) wird K_p wie folgt berechnet:

$$K_p = \Delta t \cdot RHS(\phi^n + a_p K_{p-1}) \quad (5.36)$$

Um den Dispersions- und Dissipationsfehler zu minimieren wurden die Koeffizienten a_p angepasst. Aufgrund der Summation in Definition (5.36) können die Koeffizienten zusammengefasst werden. Die zusammengefassten Koeffizienten c_p sind in der Tabelle 5.1 angegeben:

Tabelle 5.1: Koeffizienten des LDDRK-Schemas

| Stufenanzahl | c_1 | c_2 | c_3 | c_4 | c_5 | c_6 |
|--------------|-------|-------|----------|-----------|------------|------------|
| 5 | 1 | 0.5 | 0.166558 | 0.0395041 | 0.00781071 | - |
| 6 | 1 | 0.5 | 1/3! | 1/4! | 0.00781005 | 0.00132141 |

5.2.3 Numerisches Gesamtverfahren

Analog zu der numerischen Strömungssimulation werden für die Lösung des diskretisierten Gleichungssystems zur Beschreibung des akustischen Feldes Anfangs- und Randbedingungen benötigt. In PIANO sind zahlreiche akustische Randbedingungen implementiert, auf

die in dieser Arbeit nicht im Detail eingegangen wird. Für detaillierte Informationen sei hier auf die weiterführenden Literaturen verwiesen. In dieser Arbeit wurden zwei prinzipielle Typen von Randbedingungen verwendet, um die physikalischen Begrenzungen des Rechengebietes abzubilden. Die im Simulationsgebiet vorkommenden physikalischen Wände wurden mit einer speziellen Wandrandbedingung von [119] abgebildet, die speziell für die Anwendung von FD-Verfahren mit hohen Ordnungen entwickelt wurden. Hierbei wird zur Erhaltung der hohen Diskretisierungsordnung das sogenannte Geisterpunktkonzept (engl. *ghost point concept*) angewendet, welches zusätzliche Knotenpunkte in die Wandnormalenrichtung aus dem numerischen Rechengebiet spiegelt, um einen sieben Punkte Rechenstern für den Knotenpunkt auf der physikalischen Wand zu erhalten. Die Fluktuation des Druckes wird mit Hilfe einer Druckgleichung an der Wand so gesetzt, dass die Schallschnellen \vec{u} an der Wand eliminiert werden:

$$\vec{n} \cdot \vec{u} = 0 \quad (5.37)$$

An den Aus- und Eintrittsflächen wurden nichtreflektierende Randbedingungen verwendet. Diese speziellen Abstrahlrandbedingungen wurden von [118] für das DRP-Verfahren entwickelt. An den Austrittsflächen verlassen die mit der konvektiven Strömungsgeschwindigkeit transportierten Entropie- und Wirbelstrukturen reflexionsfrei das Rechengebiet. Dies gilt analog für die akustischen Wellen, die sich mit Schallgeschwindigkeit ausbreiten. Um den reflexionsfreien Übergang zu gewährleisten, benötigt die Abstrahlrandbedingungen vorab einen Quellursprung X_{ref} von dem eine Störung des Feldes ausgeht, um die Schwankungen an den Austrittsflächen vollständig zu eliminieren. Die Bestimmung eines oder mehrerer exakter Quellorte gestaltet sich in einem technischen Verbrennungssystem als schwer umsetzbar. Aus diesem Grund wurde an den Austrittsflächen zusätzlich eine sogenannte *Sponge-Layer* Randbedingung angewendet, die je nach Definition und Einstellung, auf einem gewissen vor der Berechnung definierten Zellenbereich, vor der Austrittsfläche eine künstliche Dämpfung der eintreffenden Feldstörungen dämpft, um die Stabilität der Abstrahlrandbedingungen zu verbessern. Um hochfrequente Störschwingungen mit sehr kleinen Wellenlängen auf dem numerischen Gitter zu vermeiden, wurde eine Filterung achter Ordnung nach [103, 122] angewendet, welche räumlich nicht auflösbare Störungen unterdrückt. Neben den Randbedingungen werden für die Berechnung des akustischen Feldes Anfangs- bzw. Startbedingungen benötigt. Diese Bedingungen als auch das Grundströmungsfeld werden in dieser Arbeit über die Anfangsbedingungen aus der überlagerten Strömungssimulation bestimmt und über eine Austauschschnittstelle vor der akustischen Berechnung an PIANO übergeben. Auf die im Kontext der hybriden CFD/CAA verwendeten Kopplungsstrategien wird im Folgenden näher eingegangen.

5.3 Kopplungsstrategien

Das Ziel dieser Arbeit ist, wie in Kapitel 1.3 erwähnt, einen industriell anwendbaren Ansatz für die Berechnung von thermoakustischen Einflüssen zu finden, der die akustischen Rückwirkungen auf eine reagierende Umgebung in eingeschlossenen, technischen Verbrennungssystemen abbilden kann. Der theoretisch einfachste Weg zur Berechnung des thermoakustischen Verhaltens von eingeschlossenen technischen Verbrennungssystemen kann über eine voll kompressible, reagierende, instationäre Strömungssimulation er-

folgen. Hier wurden zahlreiche Arbeiten durchgeführt, bei denen Schalldruckspitzen und thermoakustische Instabilitäten diagnostiziert werden konnten [81, 51, 99]. Jedoch ist es ohne zusätzliche Hilfsmittel nicht möglich den Ursprung und die Wachstumsmechanismus einer thermoakustischen Instabilität aus einer kompressiblen CFD zu separieren [29]. Auf der anderen Seite ist die Lösung mit einer kompressiblen CFD mit einem enormen zeitlichen und finanziellen Aufwand verbunden, weil die numerisch bedingte räumliche und zeitliche Auflösung an die aufzulösenden Frequenzen und die zugrundeliegenden Schallgeschwindigkeiten des Verbrennungssystems angepasst werden müssen.

Aus diesem Grund ist in der Vergangenheit vor allem im industriellen Umfeld ein verstärktes Interesse an den hybriden Berechnungsansätzen aufgekommen. Hierbei wird eine Skalenseparation zwischen den hydrodynamischen und akustischen Effekten durchgeführt, um eine effiziente, kostenreduzierte thermoakustische Analyse von technischen Verbrennungssystemen durchführen zu können. Bei den hybriden Verfahren gibt es zahlreiche Vorgehensweisen die entweder auf einer instationären oder auf einer stationären CFD basieren. Bei den stationären CFD Simulationen muss zusätzlich eine, auf statistischen Grundlagen basierende, akustische Quelltermgenerierung und -verteilung durchgeführt werden, bevor im Anschluss an die CFD Simulation die akustische Wellenausbreitung entweder mit akustischen Störgleichungsansätzen wie den LEE bzw. APE oder mit Hilfe von akustischen Analogien berechnet werden kann. Bei der Verwendung einer instationären CFD werden die akustischen Quellterme in der reagierenden Strömungssimulation räumlich und zeitlich aufgelöst und eine zusätzliche statistische Auswertung entfällt. In dieser Arbeit wird eine instationäre, inkompressible LES mit den linearisierten Eulergleichungen (LEE) für die Berechnung der Wellenausbreitung gekoppelt. Hierzu muss eine Schnittstelle formuliert werden, die einen Austausch zwischen der CFD und der CAA bewerkstelligen kann. In dieser Arbeit kann kein einfacher monolithischer Ansatz verfolgt werden, bei dem die Kopplung auf zwei identischen numerischen Gittern für die CFD und die CAA basiert, weil das verwendete CFD Programm unstrukturierte Gitter voraussetzt, wohingegen das CAA Programm auf block-strukturierten Gittern basiert. Ein weiterer Punkt ist, dass die CFD auf einer finiten-Volumen Methode basiert, wo die Variablenwerte im Zellzentrum gespeichert werden und die CAA eine finite-Differenzen Methode verwendet, bei der die Variablenwerte an den Zelleckpunkten gespeichert werden. Um eine effiziente, problemgerechte hybride Simulation von einem technischen Verbrennungssystem durchführen zu können, ist es außerdem wünschenswert, dass die numerischen Gitter der verwendeten CFD und CAA sich voneinander unterscheiden können. Hierin ist ein entscheidender Vorteil der hybriden CFD/CAA Methode begründet. Für eine reagierende CFD im LES Kontext wird wegen der aufzulösenden turbulenten Fluktuationen und der ausreichend hohen numerischen Auflösung der Reaktionszone ein deutlich höher aufgelöstes numerisches Gitter vorausgesetzt als dies bei der akustischen Wellenausbreitung in der CAA im niedrigen kHz Bereich die Notwendigkeit ist. Desweiteren kann es situationsbedingt sinnvoll sein, dass sich die numerisch diskretisierten Bereiche, der zu berechnenden Geometrie, in der CFD und der CAA voneinander unterscheiden. Dies wird deutlich, an der in dieser Arbeit berechneten Freistrahlf Flamme (H3-Flamme) in Kapitel 7, wo der numerisch berechnete Bereich der CFD um ein vielfaches kleiner ist als der in der CAA. In dieser Arbeit wurde ein, in vorangegangenen Arbeiten bewährtes, nicht statistisches, räumliches Interpolationsverfahren [104] verwendet, um die Variablenwerte sowie die

Quellterme zwischen den unstrukturierten FV-Methoden Gitter der CFD und dem blockstrukturierten FD-Methoden Gitter der CAA zu interpolieren. Die Interpolationsmethode wird auch als inverse Distanzgewichtung (engl. *Inverse Distance Methode*) bezeichnet und beschreibt eine mit zunehmendem Abstand abnehmende Ähnlichkeit des unbekannten zum bekannten Referenzwert. Die mathematische Formulierung der Interpolationsmethode besagt:

$$F(x, y, z) = \sum_{i=1}^n w_k f_k \quad (5.38)$$

das sich die zu interpolierende Variable $F(x, y, z)$ aus der Summe der Nachbarwerte f_k multipliziert mit deren räumlichen Gewichtungsfaktoren w_k ergibt. Die Interpolationsgewichte w_k erhält man über die Formulierung:

$$w_k = \frac{h_k^{-p}}{\sum_{j=1}^n h_k^{-p}}. \quad (5.39)$$

In Definition (5.39) wird der Exponent p üblicherweise $p = 2$ gesetzt. h_k bezeichnet den Abstand zwischen dem Referenzpunkt und dem benachbarten Punkt und wird wie folgt definiert:

$$h_k = \sqrt{(x - x_i)^2 (y - y_i)^2 (z - z_i)^2}. \quad (5.40)$$

Die Anzahl ($k = 1, \dots, n$) der benachbarten Punkte kann frei gewählt werden und wurde in dieser Arbeit auf $k = 14$ erweitert, um die teilweise sprunghaften Quelltermverteilungen aus der Reaktionszone der CFD, in der CAA, mit ihrer hohen räumlichen Ordnung, eine kompakte Verteilung der akustischen Quellen zu gewährleisten. Eine schematische Darstellung der räumlichen Interpolation zwischen der unstrukturierten FVM aus der CFD zu der strukturierten FDM aus der CAA, welche in dieser Arbeit für die hybride CFD/CAA Methode verwendet wurde, ist in Abbildung 5.3 gezeigt.

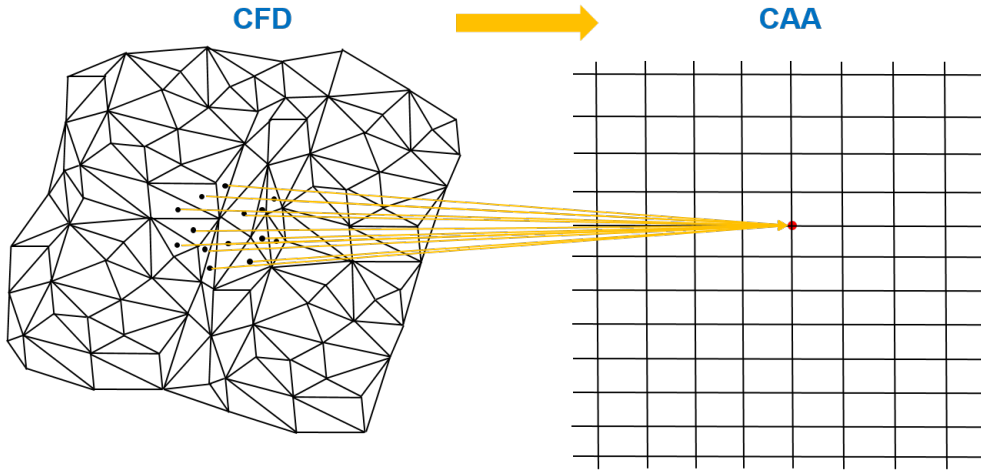


Abbildung 5.3: 2-dimensionale schematische Darstellung der Abbildung der Interpolationsgewichte für einen CAA Gitterknoten aus 14 umgebenden CFD Kontrollvolumenwerten für die Ein-Wege Kopplung

Zur Glättung der akustischen Quelltermverteilung wurde die interne Filterung achter Ordnung von [103, 122] auf die akustischen Quellterme angewendet, um numerisch ungünstige Quelltermsprünge in der Reaktionszone zu minimieren.

Neben der räumlichen Interpolation ist eine zeitliche Interpolation für die akustischen Quellterme in der CAA notwendig. Dieser Umstand ergibt sich aus der zeitlichen Skalenseparation zwischen den strömungsmechanischen und akustischen Transportgeschwindigkeiten, die sich im Extremfall um einige Größenordnungen unterscheiden können. Aus diesem Grund wird ein CFD Zeitschritt Δt_{CFD} in der CAA mit mehreren zeitlichen Unterschritten (Subiterationen) $\Delta t_{CAA} < \Delta t_{CFD}$ nachgerechnet. Der CAA Zeitschritt Δt_{CAA} wird abhängig von den verfahrensbedingten Stabilitätsgrenzen, definiert durch die CFL-Zahl, an den CFD Zeitschritt Δt_{CFD} angepasst. Hierbei wird eine quadratische Stirling-Interpolation [13] für die CAA Quellterme verwendet, die zeitlich aus den zwei vorangegangenen und den aktuellen Quelltermen besteht.

5.3.1 Ein-Wege Kopplung

Im allgemeinen wird von einer Ein-Wege Kopplung gesprochen, wenn der Variablen austausch nur in eine Richtung stattfindet und somit keine rückwirkende Beeinflussung zwischen Programmen besteht. Dieser Ansatz ist im Kontext der Verbrennungsrechnung ausreichend, wenn nur die Berechnung von Verbrennungslärm im Fokus steht. Hierbei werden nur die akustischen Quellen und das inhomogene Strömungsfeld von der CFD an die CAA übergeben. Die CAA berechnet die Wellenausbreitung ohne das CFD Strömungsfeld und somit die Verbrennung zu beeinflussen. In der Vergangenheit wurden zahlreiche Arbeiten veröffentlicht, die den Verbrennungslärm von turbulenten Freistrahlfammen mit Hilfe einer Ein-Wege Kopplung erfolgreich berechnet haben [37, 16, 64, 83]. Die Ein-Wege Kopplung kann bei der hybriden CFD/CAA Berechnung auf zwei unterschiedliche Arten durchgeführt werden. Zum einen kann die CAA Berechnung auf Basis von zeitlich gespeicherten Quellterm- und Strömungsfeldverteilungen nach der CFD in einem nachfolgenden zweiten Berechnungsschritt (Postprocessing-Schritt) erfolgen. Hierbei müssen die Daten der akustischen Quellen und des Strömungsfeldes von bestimmten Zeitschritten gespeichert werden, damit sie in der nachfolgenden CAA genutzt werden können. Zum anderen kann die CAA Berechnung, wie auch in dieser Arbeit, in einem simultanen CFD/CAA Berechnungsverfahren integriert sein, so dass prinzipiell nur ein Berechnungsschritt ausgeführt werden muss und Strömungsfeld- und akustische Felddaten gleichermaßen vorliegen.

5.3.2 Zwei-Wege Kopplung

Bei der Zwei-Wege oder auch akustischen Rückkopplung wird, wie der Name schon sagt, ein Informationsaustausch in zwei Richtungen vorausgesetzt. Im Kontext der hybriden CFD/CAA werden zusätzlich zu dem Informationsaustausch der Ein-Wege Kopplung in die CAA Informationen aus der CAA zurück in die CFD zurückgeführt, welche das reagierende Strömungsfeld und somit die akustischen Quellterme in der CAA beeinflussen können. Bei der Zwei-Wege Kopplung wird ein simultaner Berechnungsschritt der CAA parallel zur CFD zwingend erforderlich, so dass eine nachträgliche Berechnung der akustischen Schallausbreitung wie bei der Ein-Wege Kopplung nicht möglich ist. Mit der Rückkopplung von akustischen Störungen in das reagierende Strömungsfeld, ist es möglich die geometrieabhängigen Interaktionen zwischen der Akustik und der reagierenden Strömung abzubilden. Ein besonderes Interesse gilt hier der besonders starken Beeinflussung der

reagierenden Strömung und speziell der Reaktionszone im Fall der thermoakustischen Instabilität. Für den rückwärtigen Informationsaustausch in die CFD wird eine Interpolation benötigt, welche den Informationsaustausch von der CAA in die CFD bereitstellt. Hierzu wurden in dieser Arbeit die aus der Ein-Wege Kopplung bestehenden Interpolationsgewichte, wie sie in Kapitel 5.3 vorgestellt wurden, in umgekehrter Richtung verwendet. Hierbei verteilt ein CAA Knotenpunkt seine Informationen in umgekehrter Weise an 14 räumlich umliegende CFD Kontrollvolumen, wie in Abbildung 5.4 verdeutlicht.

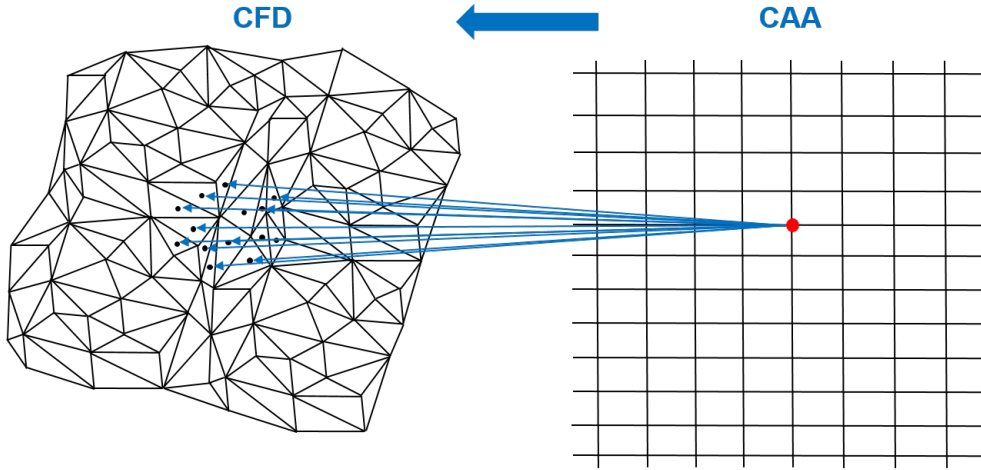


Abbildung 5.4: 2-dimensionale schematische Darstellung der Rückinterpolation von einem CAA Gitterknoten aus 14 umliegende CFD Kontrollvolumen

Es sind unterschiedliche Vorgehensweisen möglich, um die physikalischen Vorgänge bei der akustischen Beeinflussung des reagierenden Strömungsfeldes im Rahmen einer inkompressiblen Strömungssimulation abbilden zu können. Verbrennungsinstabilitäten werden, wie in Kapitel 4.3 beschrieben, durch einen gleichphasigen Energietransport zwischen der thermischen Wärmefreisetzung und den akustischen Druckfluktuationen hervorgerufen. Für die Abbildung von Verbrennungsinstabilitäten, muss der durch die akustische Störung induzierte phasengleiche Energietransport zwischen dem reagierenden Strömungsfeld und dem akustischen Feld geeignet wiedergegeben werden. Hierzu wurden in der Vergangenheit einige Ansätze vorgestellt die im Folgenden näher erläutert werden sollen.

Modulation der Eintrittsmassenströme

Dieser sehr einfache Ansatz beruht auf der Rückkopplung der akustischen Schallschnelle u'_i auf die Eintrittsrandbedingungen in der Strömungssimulation, wodurch eine Schwankung des zugeführten Luftmassen- bzw. Brennstoffmassenstroms hervorgerufen werden soll. Hierbei setzt sich die instantane Eintrittsgeschwindigkeit in der CFD aus 3 Komponenten zusammen:

$$u_{i,ein} = \bar{u}_{i,CFD} + u'_{i,CFD} + u'_{i,CAA} \quad (5.41)$$

In Definition (5.41) repräsentieren die ersten beiden Terme den strömungsmechanischen Anteil der Eintrittsgeschwindigkeiten, wie sie auch bei der Ein-Wege Kopplung vorliegen würden. Der dritte Term wird aus der Schallschnelle des Akustiklösers gewonnen und

zu den Eintrittsgeschwindigkeiten addiert. In der Vergangenheit wurden kompressible Grobstruktursimulationen durchgeführt, bei denen, aus experimentellen Studien erhaltene, instabile Betriebsfrequenzen auf die Eintrittsmassenströme aufgeprägt wurden und eine Äquivalenzverhältnisschwankung hervorgerufen wurde [3]. Mit diesen Simulationen konnte der experimentell beobachtete zeitlich bedingte Phasenversatz zwischen der akustischen Anregung und der Änderung der Reaktionsrate in der Brennkammer abgebildet werden. Dieser Ansatz modelliert die akustische Anregung des Gesamtsystems durch eine Beeinflussung der globalen Strömungszustände an den Eintrittsrandbedingungen. Mit diesem Ansatz können aufgrund der räumlichen Trennung zwischen der akustischen Quelle und der hieraus resultierenden zeitlich verzögerten strömungsmechanischen Beeinflussung der Eintrittsrandbedingungen keine lokalen Änderungen des Strömungsfeldes und der Verbrennung infolge der akustischen Druckfluktuationen abgebildet werden.

Druckterm in der Impulserhaltungsgleichung

Um die lokalen Wechselwirkungen der akustischen Fluktuationen in technischen Verbrennungssystemen abbilden zu können, wurde in dieser Arbeit eine direkte lokale Rückkopplung von akustischen Fluktuationen auf das zugrundeliegende Strömungsfeld realisiert. Bei diesem Ansatz wird in der Impulserhaltungsgleichung (2.57) in jedem Kontrollvolumen zu dem bestehenden Druckgradienten $\partial \bar{p} / \partial x_i$ ein akustischer Druckgradient $\partial p' / \partial x_i$ addiert, der eine akustisch motivierte Fluktuation der Strömungsgeschwindigkeiten erzeugt und somit die lokalen Beeinflussungen des reagierenden Strömungsfeldes infolge der akustischen Eigenschaften des Systems modellieren kann:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\mu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] + \rho g_i - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial p'}{\partial x_i}. \quad (5.42)$$

Über die Definition (5.42) wird der inkompressiblen Simulation des reagierenden Strömungsfeldes durch den akustischen Druckgradienten eine kompressibel transportierte akustische Schwankung überlagert, welche die lokalen Strömungs- und Mischungszustände bzw. Äquivalenzverhältnisse verändert und hierdurch die geometrieabhängigen akustischen Eigenschaften in die inkompressible Simulation integriert. Dieser Ansatz wurde erstmals von [29] vorgeschlagen, jedoch nie Ergebnisse hierzu veröffentlicht.

Bei der Rückkopplung in PRECISE-UNS wird eine Rückinterpolation der akustischen Druckschwankungswerte p' verwendet, welche den akustischen Druck in gelätteter Form einbringt, um sprunghafte Druckübergänge zu vermeiden. Der in der CFD verwendete akustische Druckgradient wird in Abhängigkeit der räumlichen Diskretisierung in PRECISE-UNS gebildet, weil zwischen dem numerischen Gitter der CAA und dem der CFD ein deutlicher Unterschied bestehen kann. Um bei der Initialisierung der Rückkopplung keine Überhöhungen in den akustischen Quelltermen sowie rückwirkend in der Strömungssimulation abbilden zu müssen, wurde eine linear ansteigende Quellenformulierung verwendet. Es ist zu beachten, dass im Rahmen einer Grobstruktursimulation bei der Verwendung der Gleichung (5.42) nur gefilterte Größen berechnet werden können. Die geometriebedingten thermoakustischen Verbrennungsinstabilitäten treten im niedrigen Frequenzbereich auf [68, 92], weshalb die in diesem niedrigen Frequenzbereich typischen akustischen Wellenlängen durch die gefilterten Größen wiedergegeben werden können, ohne dass ein großer Einfluss der nicht aufgelösten Größen zu erwarten ist. Der Einfluss der

nicht aufgelösten, modellierten Skalen würde sich erst in einem sehr hohen Frequenzbereich bemerkbar machen. Aus diesem Grund wird eine spezielle Behandlung der nicht aufgelösten Skalen in dieser Arbeit vernachlässigt.

Kapitel 6

Generische Testfälle

Auf eine prinzipielle Validierung der verwendeten Strömungs- und Akustiklöser wird im Rahmen dieser Arbeit verzichtet, weil die verwendeten Simulationsprogramme einzeln für sich durch die Dokumentation in zahlreichen Anwendungsfällen hinsichtlich der implementierten Methoden in der Literatur ausreichend validiert wurden und sich im akademischen sowie industriellen Umfeld seit Jahren in Anwendung befinden. Für einen detaillierten Überblick des verwendeten Programm PRECISE-UNS zur Berechnung der reagierenden Strömung sei auf weiterführende Literatur verwiesen [2, 5]. Hinsicht des verwendeten Akustiklösers PIANO sind in der Vergangenheit ebenfalls zahlreiche Arbeiten durchgeführt worden, welche neben der Berechnungen von offenen auch die Berechnung von eingeschlossenen Verbrennungssystemen beinhalteten [14, 83, 63, 46].

In diesem Kapitel wird eine Verifizierung der Interpolationsschnittstelle vorgenommen, die zur Integration der beiden verwendeten Simulationsprogramme benötigt wurde. Abschließend wird eine reine akustische Berechnung der eingeschlossenen generischen Brennkammer vorgestellt. Hiermit wird gezeigt, dass das verwendete Programm zur Berechnung der akustischen Wellenausbreitung die Eigenfrequenzen der generischen Brennkammer numerisch berechnen kann.

6.1 Interpolationsschnittstelle

Bei dem hybriden LES/CAA-Verfahren kommt der Interpolationsschnittstelle eine zentrale Bedeutung zu. Über diese Schnittstelle werden die akustischen als auch die zurückgekoppelten Quellterme sowie die Strömungsparameter zwischen dem Strömungs- und Akustiklöser ausgetauscht. Zur Überprüfung der Schnittstelle wurden Vergleichsrechnungen zwischen einer reinen Akustiksimulation mit definierter Amplitude und Anregungsfrequenz und einer gekoppelten Simulation unternommen und diese miteinander verglichen. Mit der gekoppelten hybriden LES/CAA wurden zwei Simulationen mit unterschiedlicher Zeitschrittweite in der Strömungssimulation durchgeführt. Als Basis für die Berechnungen diente ein quadratischer Würfel mit einer Kantenlänge von $1m$. Die numerischen Gitter der Akustik- und der Strömungssimulation wurden identisch gewählt und hatten eine äquidistante Auflösung von $\Delta x_i = 0.02m$. Die Strömungsgeschwindigkeit wurde in allen Simulationen auf einen sehr kleinen Wert von $u_x = 0.5m/s$ gesetzt. In der CAA wurde an alle Austrittsflächen eine nichtreflektierende Abstrahlrandbedingung angewendet. In der CFD wurden neben einer Eintritts- und Austrittsrandbedingung an den vier verbleibenden Oberflächen eine Symmetrierandbedingung angewendet. Zur Überprüfung der Interpolationsschnittstelle wurde zentral im Mittelpunkt des Würfels eine künstliche,

gaußförmige, periodische Druckschwankung eingebracht:

$$p'(x_i = 0, t) = A \cdot \sin(\omega t) \cdot \exp \left[-\ln 2 \frac{(x_i - x_i^c)^2}{b^2} \right]. \quad (6.1)$$

In Definition (6.1) repräsentiert A die maximale Amplitude der Druckschwankung, ω die Kreisfrequenz der Schwingung und t die Zeit. Mit x_i^c und b wird der Mittelpunkt und die Halbwertsbreite $p'(b, 0) = A/2$ der Gaussfunktion definiert. In allen Simulationen wurde die Amplitude der Druckschwankung auf $p' = 100 \text{ Pa}$ und die Anregungsfrequenz auf $f_{test} = 1000 \text{ Hz}$ festgelegt. Der Radius des Gausspulses wurde mit $r = 0.07 \text{ m}$ definiert. Zum einen wurde die periodische Anregungsform in der CAA vorgenommen und die erhaltene Zeitreihe mit Hilfe einer FFT-Analyse (engl. *Fast-Fourier Transformation*, kurz FFT) ausgewertet, um einen Vergleichswert für die hybriden LES/CAA-Simulationen zu erhalten. In der hybriden LES/CAA wurde anhand der festgelegten Amplitude und Anregungsfrequenz in der CFD ein akustischer Quellterm berechnet und über die Interpolationsschnittstelle an die gekoppelte CAA übergeben und die Zeitreihen ebenfalls mit einer FFT-Analyse ausgewertet. In Abbildung 6.1 sind die Ergebnisse der durchgeführten Simulationen dargestellt. In Abbildung 6.1 ist in der obersten Ebene die Referenzrechnung

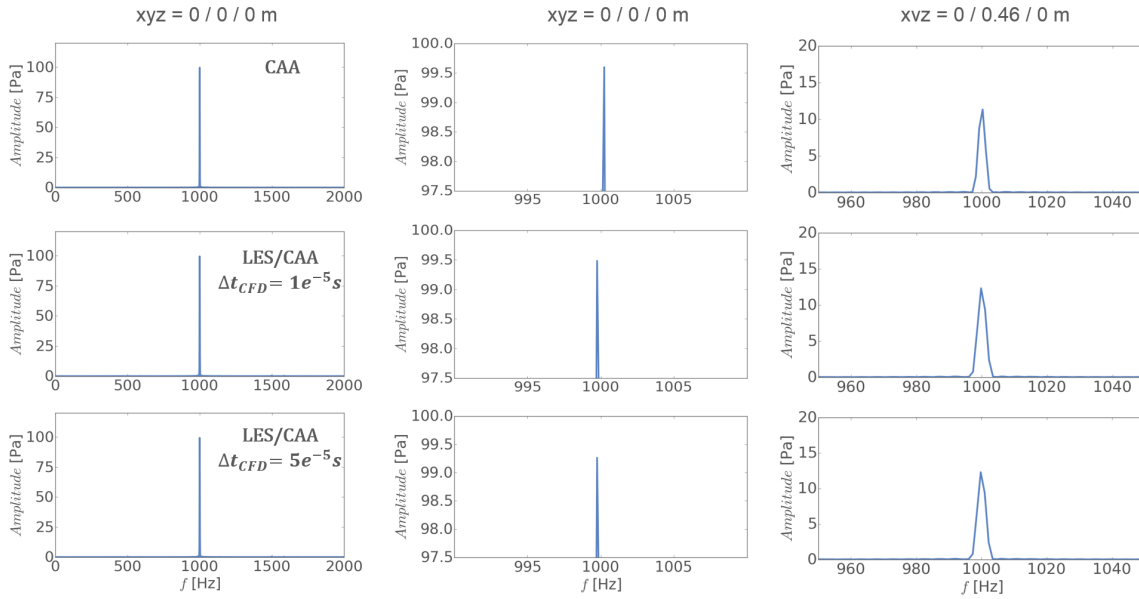


Abbildung 6.1: Vergleich zwischen reiner Akustikrechnung CAA und gekoppelter LES/CAA für unterschiedliche Zeitschrittweiten in der hybriden LES/CAA-Simulation

mit der reinen CAA dargestellt, auf die in der Mitte und in der untersten Darstellung die hybriden LES/CAA Simulationsergebnisse mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten folgen. Auf der linken Seite sind jeweils die zugehörigen Maximalwerte der einzelnen Simulationen in einer vergrößerten Darstellung an zwei unterschiedlichen Positionen gezeigt. In den vergrößerten Darstellungen sind zwischen den drei Simulationen kleine Abweichungen zu erkennen. Der Amplitudenfehler zwischen der CAA und der hybriden LES/CAA beträgt hier zwischen $0.1 - 0.2 \%$. Der geringere Wert gilt für die hybride Berechnung mit der

kleineren CFD Zeitschrittweite von $\Delta t_{CFD} = 1e^{-5} s$ (Abbildung 6.1, Mitte), bei der die CAA nur einen Unterschritte zur Berechnung des CFD Zeitschrittes benötigt und damit die geringste Abweichung zeigt. Bei der zweiten Berechnung mit einer höheren CFD Zeitschrittweite von $\Delta t_{CFD} = 5e^{-5} s$ (Abbildung 6.1, Unten) benötigt die CAA dafür 15 Unterschritte, woraus ein minimal größerer Fehler resultiert. Die Ursachen dieser Fehler können in einer gewissen zeitlichen und räumlichen Glättung infolge der zeitlichen und räumlichen Interpolation zwischen den beiden Programmen auftreten, was jedoch in geringem Maße kein Problem darstellt und verfahrensbedingt nicht zu vermeiden ist. Hinsichtlich der hohen Auflösungen bei den späteren Simulationen ist davon auszugehen, dass sich die Interpolationsfehler minimieren. Vorteilhaft erweist sich in diesem Zusammenhang die Verwendung einer reagierenden LES, weil die thermoakustischen Quellterme in der Reaktionszone im allgemeinen räumlich fein aufgelöst werden. Die CAA berechnet mit den lokalen thermoakustischen Quellen eine Wellenausbreitung, die global verteilt ist und somit gut von dem vergleichsweise grob aufgelösten CAA Gitter in die reagierende fein aufgelöste LES zurückgekoppelt werden kann.

6.2 Akustische Berechnung einer eingeschlossenen generischen Brennkammer

Thermoakustische Instabilitäten sind durch eine geometrieabhängige Wechselwirkung zwischen Systemeigenfrequenzen und akustischen Schwingungen gekennzeichnet. Technische Verbrennungssysteme sind meistens durch eine geometrische Begrenzung der Reaktionszone in Form von Brennkammerwände gekennzeichnet. Für die numerische Berechnung technischer Verbrennungssysteme inklusiver ihrer thermoakustischen Eigenschaften sind die Brennkammermoden bzw. die Eigenfrequenzen des Verbrennungssystems von entscheidender Bedeutung. In diesem Kapitel sollen anhand der in Kapitel 7.2 gezeigten generischen Brennkammer die Fähigkeiten des verwendeten Akustikprogramms PIANO-5.5 bezüglich der Beschreibung von Systemeigenmoden gezeigt werden. Die dreidimensionale Geometrie besteht aus zwei Kanalabschnitten mit einer zurückspringenden Kante und zwei abschließenden Querschnittssprüngen. Die geometrischen Abmessungen der beiden Kanalabschnitte der berechneten Brennkammer sind in Tabelle 6.1 ersichtlich:

Tabelle 6.1: Geometrische Abmessungen der generischen Brennkammer.

| Abschnitt | x [m] | y [m] | z [m] |
|-----------|-------|-------|-------|
| A | 0.19 | 0.03 | 0.06 |
| B | 1.0 | 0.06 | 0.06 |

Numerisch wurde die Geometrie der generischen Brennkammer in 108 Blöcke unterteilt und mit insgesamt 2.14 Millionen Punkten diskretisiert. Neben den schallharten Wänden wurden nichtreflektierende Abstrahlrandbedingungen an Ein- und Auslassflächen verwendet, welche für eine Erhöhung der Berechnungsstabilität mit Sponge-Layer Randbedingungen für die Dämpfung der austretenden Wellen erweitert wurden. Eine Darstellung

der numerischen Geometrie ist in Abbildung 6.2 gezeigt.

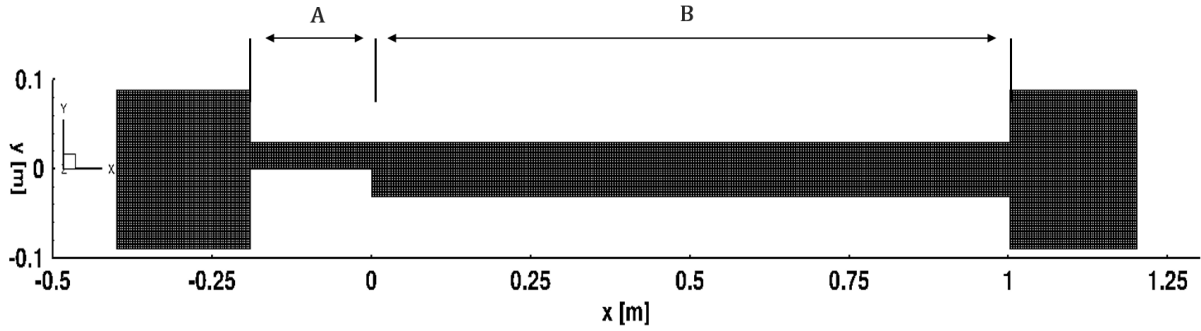


Abbildung 6.2: Darstellung des numerischen Gitters der generischen Brennkammer.

Für die numerische Bestimmung der Eigenfrequenzen wurden künstliche, periodische Schallquellen in die Simulation eingebracht, welche eine akustische Erregung des System darstellen. Die Anregung des Systems erfolgte mit Hilfe von gaußförmigen Monopolquellen

Tabelle 6.2: Anregungsfrequenzen für die numerische Eigenfrequenzbestimmung.

| Wellenzahl $k [m^{-1}]$ | Anregungsfrequenz $f [Hz]$ |
|-------------------------|----------------------------|
| 0.9 | 48.7 |
| 2.45 | 132 |

an unterschiedlichen Orten. Die Zeitreihen für das in Abbildung 6.3 gezeigte Frequenzspektrum wurden an drei axialen Positionen $x = 0.064 / 0.260 / 0.631 m$ aufgezeichnet und mittels einer FFT-Analyse ausgewertet. Die Eigenfrequenzen der einzelnen Kanalabschnitte in x-Richtung und in y- bzw. z-Richtung lassen sich für die berechnete Geometrie vereinfacht über eine analytische Formel bestimmen [92]:

$$f = \frac{a_0}{2} \left[\left(\frac{n_x}{l_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y}{l_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z}{l_z} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (6.2)$$

Die Definition (6.2) ist für die Berechnung der Raummoden in rechteckigen Geometrien geeignet. Die unterschiedlichen Raummoden lassen sich über ihre Modenzahl n in jede Raumrichtung definieren. Die Eigenfrequenzen sind bei der vereinfachten Berechnung ausschließlich von den geometrischen Abmessungen l_x, l_y, l_z und der zugrundeliegenden Schallgeschwindigkeit a_0 abhängig. Unterschiedliche Reflexionskoeffizienten an den Ein- und Auslassflächen sowie die Beeinflussung der Eigenfrequenzen durch Querschnittssprünge werden vernachlässigt. Sollen die Reflexionskoeffizienten und die akustische Beeinflussung durch Querschnittsänderungen bei unterschiedlichen Kanalabschnitten berücksichtigt werden, muss eine weitaus komplexere iterative Berechnung der Eigenfrequenzen durchgeführt werden. Für eine detaillierte Beschreibung der analytischen Eigenfrequenzberechnung bei unterschiedlichen Kanalabschnitten sei auf [92] verwiesen. Klewer [63]

zeigt in seiner Arbeit eine exemplarische Modalanalyse für eine generische Geometrie und vergleicht die analytisch berechneten Eigenfrequenzen mit numerisch berechneten Eigenfrequenzen, welche mit PIANO-5.3 erzielt wurden. Die hier durchgeführte Akustiksimulation wurde mit einer konstanten Schallgeschwindigkeit von $a_0 = 340 \text{ m/s}$ und einer sehr geringen Grundströmungsgeschwindigkeit von $u_0 = 0,34 \text{ m/s}$ mit Hilfe der linearisierten Eulergleichungen durchgeführt. Anhand der vereinfachten Definition (6.2) können einige angenäherte Eigenfrequenzen der Geometrie angegeben werden, die einen ersten Anhaltspunkt geben können, in welchem Frequenzbereich Eigenfrequenzen zu erwarten sind: Das

Tabelle 6.3: Vereinfacht berechnete Eigenfrequenzen der generischen Brennkammer.

| Abschnitt | Raummode | $l_x [m]$ | $l_y [m]$ | $l_z [m]$ | Frequenz $f [Hz]$ |
|-----------|----------|-----------|-----------|-----------|-------------------|
| B | 1,0,0 | 1 | - | - | 170 |
| A | 1,0,0 | 0.19 | - | - | 894 |
| B | 0,0,1 | - | 0.06 | - | 2833 |
| A | 0,1,0 | - | - | 0.03 | 5666 |

Ergebnis der durchgeführten Simulation ist anhand eines Schalldruckpegelspektrums in Abbildung 6.3 dargestellt. Hierin ist deutlich zu erkennen, dass neben den zwei angeregten Frequenzen weitere systemeigene Frequenzen angeregt wurden. Besonders deutlich sind die

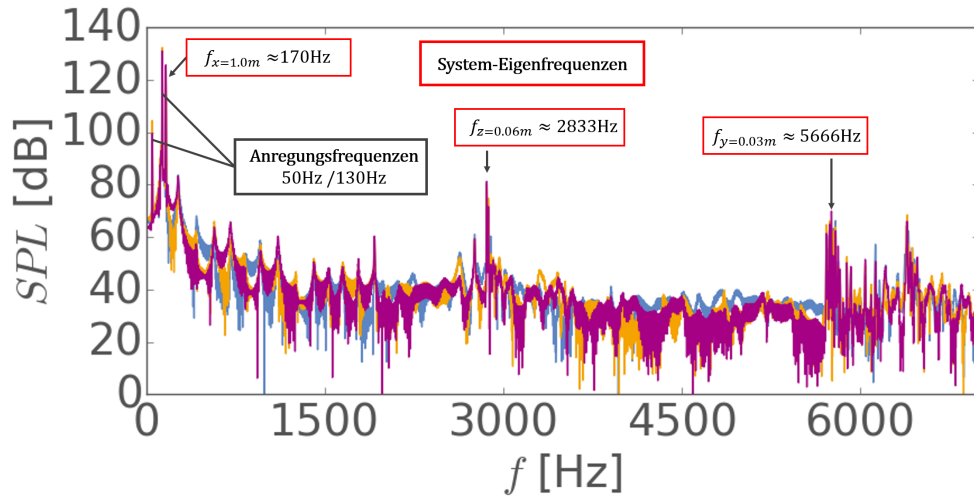


Abbildung 6.3: Schalldruckpegelspektrum der generischen Brennkammer [19] bei einer Schallgeschwindigkeit von $a_0 = 340 \text{ m/s}$

ersten akustischen Schwingungsmoden in die y - bzw. z -Richtung bei $f_{z=0.06m} = 2833 \text{ Hz}$ und $f_{y=0.03m} = 5666 \text{ Hz}$ zu erkennen, welche mit der vereinfachten analytischen Eigenfrequenzberechnung nach Definition (6.2) exakt berechnet werden konnten, da in diese

Richtungen keine Beeinflussung durch unterschiedliche Reflexionskoeffizienten oder Querschnittssprünge vorhanden sind. Im unteren Frequenzbereich unter 1000 Hz sind die ersten longitudinalen Eigenfrequenzen der generischen Brennkammer ersichtlich. Dieser Bereich ist für die numerische Abbildung von thermoakustisch angeregten Zuständen von besonderem Interesse. Mit den dargestellten Ergebnissen wurde gezeigt, dass eine numerische Simulation der Eigenfrequenzen einer eingeschlossenen Brennkammer möglich ist und die Methode im Kontext einer hybriden LES/CAA-Methode angewendet werden kann, um das thermoakustische Verhalten eingeschlossener System untersuchen zu können.

Kapitel 7

Turbulente Verbrennungssysteme

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der entwickelten hybriden LES/CAA-Methodik in Anwendung auf turbulente Verbrennungssysteme gezeigt. Hierbei wurden zwei geometrisch und von ihren akustischen Eigenschaften unterschiedliche Konfigurationen simuliert. Zum einen werden die Ergebnisse einer räumlich nicht eingeschlossenen turbulenten Freistrahlf Flamme (H3-Flamme) gezeigt, welche aufgrund der fehlenden geometrischen Begrenzung nicht zu thermoakustischen Instabilitäten neigt. Zum anderen wird anhand einer räumlich eingeschlossenen generischen Brennkammer gezeigt, dass mit der entwickelten hybriden LES/CAA-Methodik eine prinzipielle Vorhersage über die Entstehung von thermoakustischen Instabilitäten möglich ist. Für die Berechnung der reagierenden Strömungsfelder wurde in beiden Konfigurationen eine LES durchgeführt, welche zur Abbildung der chemischen Reaktionsprozesse den in Kapitel 3.3.1 vorgestellten FGM-Ansatz verwendet, der mit dem Presumed-PDF-Konzept aus Kapitel 3.3.1.4 erweitert wurde. Simultan zur der Berechnung des reagierenden Strömungsfeldes wurde bei der hier vorgestellten hybriden LES/CAA-Methode die akustische Wellenausbreitung mit Hilfe der in Kapitel 4.2.2 gezeigten linearisierten Eulergleichungen berechnet und die Druckfluktuationen in die reagierende LES zurückgekoppelt.

Die so erzielten Simulationsergebnisse werden in beiden Konfigurationen mit experimentell gemessenen Daten verglichen. Hierbei stehen neben gemessenen akustischen Feldinformationen auch Geschwindigkeitsfelder und für die turbulente Freistrahlf Flamme Verteilungen von Skalaren Größen wie dem Mischungsgrad und der Temperatur zur Verfügung. Mit den experimentellen Daten kann eine Validierung der Simulationsergebnisse vorgenommen werden.

7.1 Turbulente Freistrahlf Flamme (H3-Flamme)

Die in diesem Abschnitt vorgestellte turbulente Freistrahlf Flamme ist unter der Bezeichnung H3-Flamme bekannt. Der Name der H3-Flamme resultiert aus der Gemischzusammensetzung, die zu 50 vol% aus Wasserstoff H_2 und zu 50 vol% aus Stickstoff N_2 besteht. Diese turbulente Freistrahlf Flamme wurde im Rahmen des TNF-Workshops [6] detailliert experimentell untersucht und veröffentlicht. Bei diesen Messungen wurde das Strömungsfeld mit Hilfe der Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) vermessen und die lokalen Gemischzusammensetzungen mittels Raman-/Rayleigh und Laserinduzierter-Fluoreszenz (LIF) ermittelt [88, 116]. Die in den experimentellen Messungen gewonnenen Daten könnten sehr gut für die Validierung der durchgeführten reagierenden LES in dieser Arbeit verwendet

werden. Neben den experimentellen Strömungsfelddaten wurde die H3-Flamme im Zuge der *Combustion Noise Initiative* der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) akustisch vermessen, weshalb sie für die aus der hybriden LES/CAA gewonnenen akustischen Ergebnisse zur Validierung verwendet werden kann. Bei den akustischen Messungen der H3-Flamme [12] wurde die spektrale Verteilung der Schallintensität in einem $1\text{ m} \times 1\text{ m} \times 1\text{ m}$ Würfel mit einer Intensitätssonde an unterschiedlichen Positionen gemessen.

Die H3-Flamme wurde in der Vergangenheit in zahlreichen Arbeiten numerisch berechnet. Neben der Berechnung des reagierenden Strömungsfeldes mit Hilfe von LES Berechnungen [40, 58] wurden in jüngerer Vergangenheit zahlreiche akustische Simulationen mit der H3-Flamme durchgeführt. Die erste hybride LES/CAA Berechnung der H3-Flamme [38] basiert für die Beschreibung der akustischen Wellenausbreitung auf den Lighthill-schen Analogien, wie sie in Kapitel 4.2 vorgestellt wurden, und wird durch eine Ein-Wege Kopplung zwischen der LES und der CAA repräsentiert. In darauf folgenden Arbeiten wurde für die Berechnung der akustischen Wellenausbreitung anstelle der Verwendung von akustischen Analogien zu der Verwendung von akustischen Störgleichungsansätzen übergegangen, wie sie auch in dieser Arbeit verwendet werden. [17] verwendete bei seinem hybriden LES/CAA Verfahren zur Berechnung der Akustik die für reagierende Strömungen erweiterten APE-RF (*Acoustic Perturbation Equation for Reacting Flows*). Mit Hilfe der linearisierten Eulergleichungen (LEE) wurde von [64] eine Berechnung der akustischen Eigenschaften der H3-Flamme vorgestellt. In beiden Störgleichungsansätzen wurde die Schallausbreitung in einem homogenen Grundströmungsfeld berechnet.

7.1.1 Experimenteller Aufbau

Im Folgenden Abschnitt soll der verwendete experimentelle Aufbau zur Untersuchung der H3-Flamme beschrieben werden. Bei der H3-Flamme handelt es sich um eine turbulente Freistrah- bzw. Jetflamme, die ohne seitliche Begrenzungen frei brennen kann und als Diffusionsflamme klassifiziert wird. Das Wasserstoff/Stickstoff-Gemisch H_2/N_2 wird über eine zentral positionierte, runde Brennstoffdüse in den umgebenden, parallel verlaufenden Verbrennungsluftstrom (Coflow) eingebracht. Eine schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus ist in Abbildung 7.1 zu erkennen. Wie eingangs erwähnt besteht das brennbare Gemisch für die H3-Flamme aus 50 Vol% Wasserstoff (H_2) und 50 Vol% Stickstoff (N_2) und wird bei Umgebungstemperatur $T = 294\text{ K}$ und Umgebungsdruck $p = 101235\text{ Pa}$ zugeführt. Für die vorliegende Gemischzusammensetzung ergibt sich ein stöchiometrischer Mischungsgrad von $Z_{st} = 0.31$, welcher im Vergleich zu den häufig verwendeten gasförmigen Brennstoff wie Methan $Z_{CH_4} = 0.055$ sehr groß ist. Der Brennstoffstrom tritt mit einer mittleren Geschwindigkeit von 34.8 m/s durch eine Düse mit dem Düsendurchmesser von $d = 0.008\text{ m}$ in den parallelen verlaufenden Verbrennungsluftstrom ein, der mit einer mittleren Geschwindigkeit von 0.2 m/s deutlich langsamer ist. Mit der Viskosität des Brennstoffgemisches $\nu_{Br} = 2.74 \cdot 10^{-5}\text{ m}^2/\text{s}$ und die geometrischen Abmessungen der Düse erhält man mit der mittleren Brennstoffgeschwindigkeit an der Düse eine Reynoldszahl von $Re = 10000$. Die experimentellen Strömungsfelddaten liegen an mehreren axialen Positionen $x/d = 5/20/40/60/80$ als statistische Radialprofile vor und enthalten neben der Geschwindigkeit auch Informationen über die radialen Mischungsgradverteilungen. Zusätzlich sind als statistische Axialprofile entlang der geometrischen Mittellinie in x-Richtung die Geschwindigkeiten, die Temperatur, der Mischungsgrad, die



Abbildung 7.1: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus der turbulenten, nicht-vorgemischten H3-Flamme mit gekennzeichneteter Brennstoff- und Luftzuführung.

Massenbrüche einiger Hauptspezies sowie die OH -Radikalverteilung bekannt.

Für die experimentellen Messungen des akustischen Feldes wurde, wie eingangs erwähnt, die spektrale Verteilung der Schallintensität mittels Schallintensitätssonden in einem $1m \times 1m \times 1m$ Würfel aufgenommen [12]. Hierzu wurde der vorher gezeigte experimentelle Aufbau für die Strömungsmessungen in den akustischen Prüfstand integriert. In Abbildung 7.2 ist eine schematische Abbildung des experimentellen Aufbaus gezeigt. Es wurden Zeitreihen der Schallintensität ausgehend vom Düsenaustritt an verschiedenen axialen Positionen in einem radialen Abstand von $0.4m$ und $0.5m$ zur Mittelachse aufgenommen.

7.1.2 Numerischer Aufbau

Alle im Folgenden gezeigten Ergebnisse sind mit dem vorgestellten Strömungslöser PRECISE-UNS erzielt worden, welcher mit dem Akustiklöser PIANO zu einem hybriden LES/CAA-Verfahren gekoppelt wurde. Für die Diskretisierung wurden in PRECISE-UNS Verfahren zweiter Ordnung und in PIANO Verfahren vierter Ordnung eingesetzt. Zur Vermeidung von Oszillationen in den verwendeten Skalargleichungen der reaktiven Strömungssimulation wurde das MinMod-Verfahren angewendet. Die grundsätzliche Vorgehensweise und Details zur allgemeinen Diskretisierung sowie dem numerische Gesamtverfahren der Strömungssimulation sind in Kapitel 5.1 zu finden. Allgemeine Details zu dem Akustiklöser PIANO wurden in Kapitel 5.2 vorgestellt. Im folgenden Absatz werden die Details zu dem numerischen Aufbau bei der Strömungssimulation vorgestellt, auf den im zweiten Absatz der Aufbau der Akustiksimulation folgt.

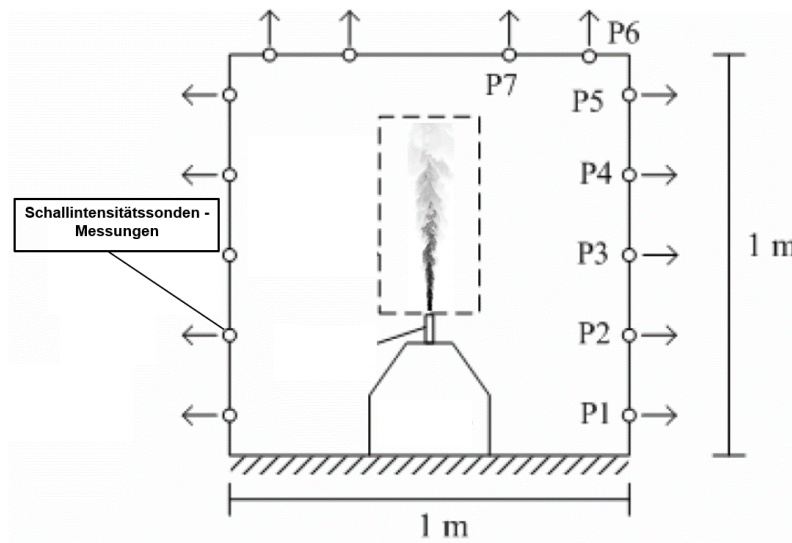


Abbildung 7.2: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus zur Messung der akustischen Schallintensität mit Hilfe von Schallintensitätssonden [12]

Für die Abbildung der turbulenten, reagierenden Strömung wurde bei der H3-Flamme eine Grobstruktursimulation (LES) durchgeführt, welche zur Bestimmung der turbulenten Feinstrukturspannungen das Smagorinsky-Modell mit dynamischer Ermittlung der Modellkonstante verwendet. Für die laminare wie auch turbulente Schmidt-Zahl wurde in dieser Simulation $S_c = S_{c_t} = 0.7$ angenommen. Für die Modellierung der chemischen Reaktionen wurde die notwendige Chemietabelle mit dem Programm CHEM1D [20] unter Verwendung des GRI-3.0-Reaktionsmechanismus [111] mit 21 Reaktionen und 8 beteiligten Spezies erzeugt. Bei der H3-Flamme kommt wegen der Verbrennung von Wasserstoff H_2 nur H_2O als Reaktionsfortschrittsvariable C in Frage, weil kein Kohlenstoff C in dem Gemisch und in der Luft enthalten ist, der eine Bildung von CO_2 mit sich bringt. Für die Abbildung der Turbulenz-Chemie-Interaktion bei dem verwendeten Ansatz der tabellierten Chemie wurde der Presumed-PDF-Ansatz aus Kapitel 3.3.1.4 gewählt. Hierbei wurde für die Reaktionsfortschrittsvariable eine δ -PDF und für den Mischungsgrad eine β -PDF als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion verwendet. Die Chemietabelle enthält für den Mischungsgrad 100 und für die Abbildung des Reaktionsfortschrittes 25 Stützstellen. Die Varianzen der beiden Variablen wurden mit 15 Stützstellen approximiert. Bei der Generierung der Chemietabelle wurde die Annahme gleicher Diffusionsgeschwindigkeiten ($Le = 1$) zugrunde gelegt.

Für die räumliche Abbildung der Problemgeometrie wurde für die Strömungssimulation eine aus Hexaedern bestehende räumliche, dreidimensionale Diskretisierung des Rechengebietes vorgenommen. Das erzeugte blockstrukturierte numerische Gitter besteht aus ca. 4.1 Millionen Kontrollvolumen und die räumliche Auflösung wurde im Kern- und Düsenbereich verfeinert, um die Reaktionszone und die Wirbelgenerierung in der sich ausbildenden Scherschicht wiedergeben zu können. Es wurde eine O-Gitter-Struktur angewendet, um im äußeren Geometriebereich, in dem keine Reaktionen stattfinden und die Strömungsbewegungen nahezu laminar mit niedrigen Geschwindigkeiten erfolgen,

keine unnötig feine räumliche Auflösung in radialer Richtung zu erhalten. Hierdurch wurde eine ausreichend feine Auflösung der Flamme kombiniert mit einer Einsparung von Zellen im wenig interessanten radialen Randbereich. Die Abmessungen des Rechenggebietes betragen ab dem Düsenaustritt in axialer Richtung $92.5d$ und in radialer Richtung maximal $62.5d$ am Ende der Geometrie. Für eine zusätzliche Rechenzeiterparnis wurde das numerische Gitter in Richtung des Geometrieendes aufgeweitet, um unnötige Kontrollvolumen in den Randbereichen einzusparen. Die Düsengeometrie wurde bis zum Austritt des Brennstoffstrahls auf $18.75d$ verlängert, um am Austritt eine ausgebildete turbulenten Rohrströmung zu erhalten. Zusätzlich wurde am Einlass in das Rohr ein turbulentes Strömungsprofil vorgegeben. An der Austrittsfläche des Rechenggebietes wurde eine Nullgradientenbedingung angewendet. Die Zeitschrittweite wurde in der CFD auf $\Delta t_{CFD} = 2e^{-6}s$ festgelegt.

Für die Akustiksimulation wurde ein separates dreidimensionales, numerisches Gitter erzeugt, welches deutlich von den Abmessungen des vorher vorgestellten CFD Gitters abweicht. Die numerische Geometrie der Akustiksimulation wurde notwendigerweise im Vergleich zu der Strömungssimulation in axialer und radialer Richtung erweitert, um die Mikrofonpositionen aus den experimentellen Messungen abbilden zu können. Die Abmessungen des Rechenggebietes betragen in axialer Richtung $150d$ und in radialer Richtung $187,5d$ von der Mittelachse und besitzt eine zylindrische Form. In PIANO wurde bei der Akustiksimulation das DRP-Verfahren [118] vierter Ordnung angewendet, weshalb ein vierte Ordnung glattes Gitter anzustreben ist. Aus diesem Grund wurde für die zylindrische Form des CAA Rechenggebietes ein blockstrukturiertes O-Gitter erzeugt, welches sich aus 72 Blöcken zusammensetzt und ca. 20 Millionen Zellen besitzt. Alle numerischen Gitter wurden mit dem kommerziellen Programm Ansys ICEM CFD [4] generiert. Das Rechenggebiet wurde von akustisch nicht reflektierenden Abstrahlrandbedingungen [118] umgeben. Bei der Akustiksimulation sind ähnlich wie bei der Strömungssimulation Auflösungs- und Stabilitätsgrenzen einzuhalten. Die zulässige maximale räumliche Auflösung orientiert sich in der CAA an dem verwendeten Diskretisierungsschema und der maximal gewünschten Frequenzauflösung f_{max} . Das DRP-Verfahren vierter Ordnung benötigt mindestens 7 Punkte pro Wellenlänge (PPW), womit das verwendete Gitter in Bezug auf die maximale Gitterweite von $\Delta x_i = 0.006m$ und einer angenommenen Schallgeschwindigkeit von $a \approx 343m/s$ eine Frequenz von $f_{max} = a/(2\Delta x_i) \approx 4000Hz$ auflösen kann. Die maximal zulässige Zeitschrittweite $\Delta t_{CAA,max}$ für die Akustiksimulation wird bei dem verwendeten LDDRK-Zeitdiskretisierungsverfahren [50] nach Definition:

$$\Delta t_{CAA,max} = \frac{2.83 \Delta x_{i,min}}{\pi M a_{local}} \quad (7.1)$$

berechnet und ist eine Funktion der minimalen Gitterweite und der maximalen lokalen Mach-Zahl im Rechenggebiet. Erfahrungsweise wurde die maximale Zeitschrittweite in der gekoppelten hybriden LES/CAA aus Stabilitätsgründen bei den dreidimensionalen Berechnung automatisch auf 70 % des maximal möglichen Wertes reduziert. In Abhängigkeit der CFD Zeitschrittweite resultieren in der CAA vier Unterschritte mit einer Zeitschrittweite von $\Delta t_{CFD} = 3.5e^{-7}s$, mit denen der CFD Zeitschritt nachgerechnet wird. Mit der berechneten CAA Zeitschrittweite und der Gesamtrechnenzeit können die obere und

untere zeitschrittabhängige Frequenzauflösung der Akustiksimulation bestimmt werden. Mit einer Gesamtrechnenzeit von $t = 0.2 \text{ s}$ können theoretisch Frequenzen bis 10 Hz dargestellt werden. Die obere Frequenzauflösung kann nach dem Shannon Abtasttheorem mit $f \approx 1/(2 \Delta t) \approx 571 \text{ GHz}$ angegeben werden

7.1.3 Ergebnisse der hybriden LES/CAA Simulationen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der hybriden LES/CAA Methode für den Fall der turbulenten H3-Flamme zuerst anhand von experimentellen Daten für das reaktive Strömungsfeld vorgestellt und im Anschluss daran die Ergebnisse der Akustik präsentiert. Für die Simulation der H3-Flamme wurde die Berechnung mit der Rückkopplung des akustischen Druckgradienten in die Impulsgleichung der Strömungssimulation nach Definition (5.42) durchgeführt.

Reaktives Strömungsfeld

Die Ergebnisse der Strömungssimulation werden im Folgenden neben einer qualitativen Bewertung durch einen quantitativen Vergleich mit experimentellen Daten an unterschiedlichen Positionen für unterschiedliche physikalische Größen validiert.

In Abbildung 7.3 ist eine qualitative Darstellung der gemittelten sowie eine Momentaufnahme der Temperaturverteilung der H3-Flamme dargestellt. Anhand der gemittelten Temperaturverteilungen wird die für Freistrahlfammen typische Kerzenform ersichtlich, durch die sich eine klassische Diffusionsflamme auszeichnet. Eine ähnliche Beobachtung kann für den gemittelten Mischungsgrad in Abbildung 7.4 gemacht werden. Hier ist ersichtlich, wie der reine Brennstoffstrom ($Z = 1$) durch die Düse transportiert wird und nach dem Austritt aus der Düse infolge der Diffusionsprozesse reduziert und verbrannt wird. In den Momentaufnahmen der Temperatur und des Mischungsgrades kann ein Eindruck von der vorherrschenden turbulenten Strömung gewonnen werden.

Für die qualitative Bewertung der Simulationsergebnisse stehen für die Geschwindigkeit und den Mischungsgrad an fünf axialen Positionen experimentell gewonnene statistische Profile in radialer Richtung zur Verfügung. In Abbildung 7.5 ist der Vergleich der Simulationsergebnisse mit den statistischen Radialprofilen gezeigt. Bei dem Vergleich der Radialprofile für die axiale Geschwindigkeit kann festgestellt werden, dass die berechnete mittlere Axialgeschwindigkeit $\langle U \rangle$ sehr gut mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmt. In der dritten axialen Position ist eine leichte Unterschätzung der Geschwindigkeiten im Bereich der Mittelachse zu beobachten. In der letzten Ebene ($x/d = 80$) ist eine leichte Unterschätzung der experimentellen Daten über den kompletten Auswertungsbereich zu beobachten. Die Fluktuationen der Geschwindigkeit U_{rms} zeigen in der zweiten Ebene ($x/d = 20$) nahe der Mittelachse eine Überschätzung der Fluktuationen sowie eine leichte Aufweitung in der Scherschicht. Durch die leichten Überschätzungen der Geschwindigkeitsfluktuationen wird ein moderates Aufweiten der Flamme hervorgerufen, wodurch die mittleren axialen Geschwindigkeiten etwas absinken. In den letzten beiden axialen Positionen ($x/d = 60, 80$) werden die Fluktuationen leicht überschätzt. Ähnliche Beobachtungen sind bei dem Vergleich der radialen Mischungsgradprofile zu erkennen, welche durch den konvektiven Transport des Gemisches miteinander gekoppelt sind. Die

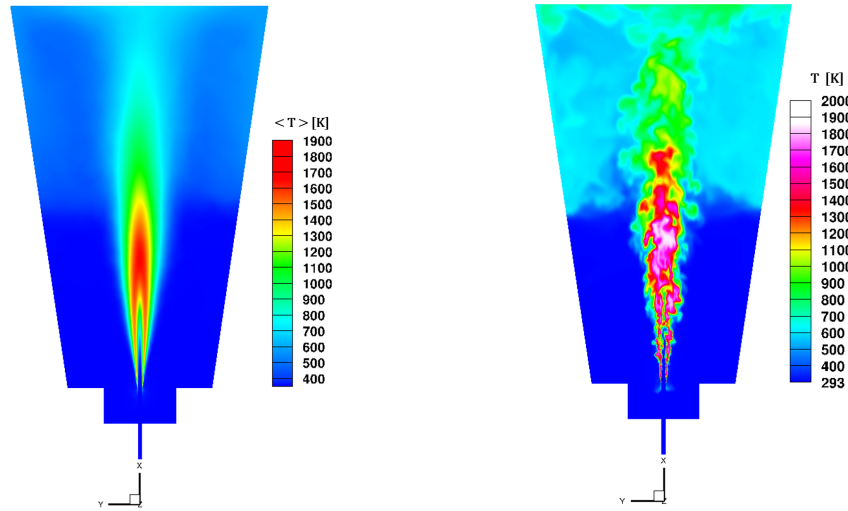


Abbildung 7.3: Darstellung einer Schnittebene für das gemittelte Temperaturfeld (links) und einer Momentaufnahme der Temperaturverteilung (rechts) der H3-Flamme.

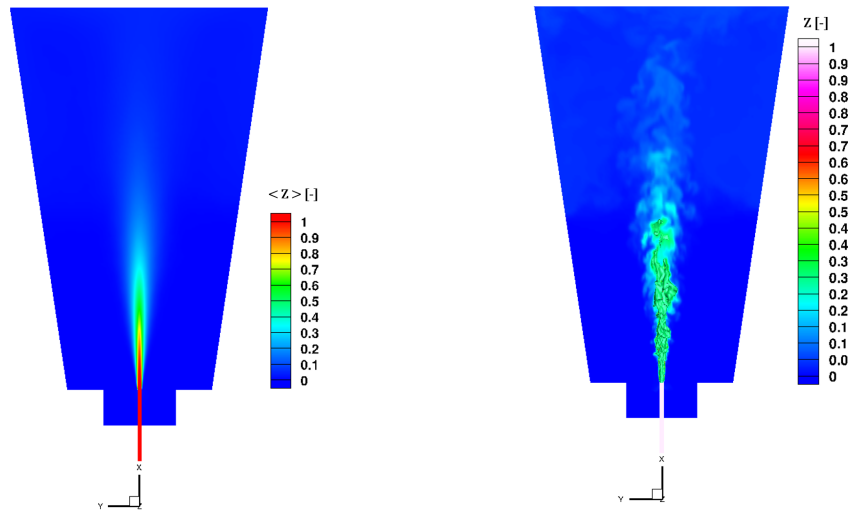


Abbildung 7.4: Darstellung einer Schnittebene für das gemittelte Mischungsgradfeld (links) und einer Momentaufnahme des Mischungsgradfeldes (rechts) mit dem stöchiometrischen Mischungsgrad $Z_{st} = 0.31$ als Isofläche für die H3-Flamme.

Mittelwerte des Mischungsgrades $\langle Z \rangle$ zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Lediglich in den letzten beiden axialen Positionen ($x/d = 60, 80$) wird von der reaktiven LES ein flacher Verlauf vorhergesagt. Bei den Fluktuationen des Mischungsgrades Z_{rms} treten in den ersten beiden axialen Positionen $x/d = 5, 20$ größere Abweichungen im Bereich der Scherschicht auf. In diesen Bereichen ist eine sehr dünne Scherschicht und Flammenfront anzutreffen. Die chemische Reaktion findet hier innerhalb weniger Zellen statt, weshalb steile Gradienten im Mischungsgradverlauf zu erwarten sind.

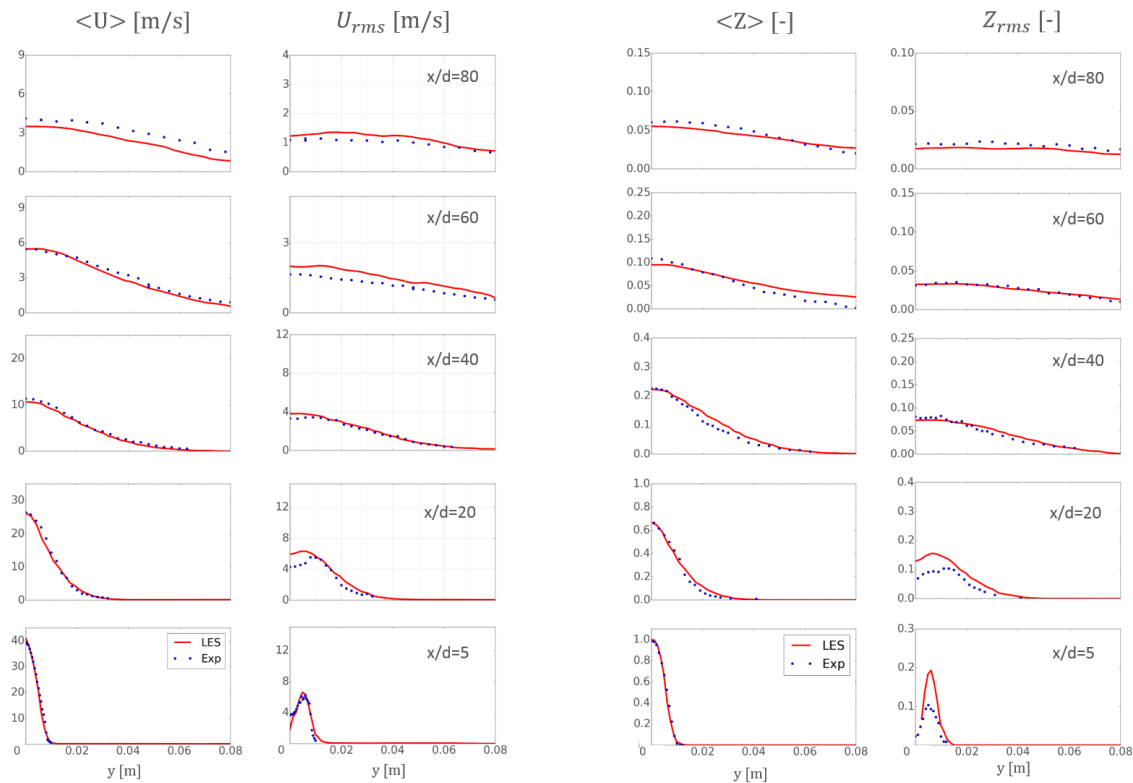


Abbildung 7.5: Vergleich der Simulationsergebnisse mit statistischen Radialprofilen für die H3-Flamme. dargestellt sind die Axialgeschwindigkeit (links) und der Mischungsgrad (rechts).

Infolgedessen kann es hier leicht zu einer Unterauflösung kommen, welche sich in einem kleinen Fehler in der Berechnung zeigt. In der zweiten Ebene ($x/d = 20$) zeigt die Fluktuation des Mischungsgrades einen ähnlichen Verlauf wie bei den Fluktuationen der axialen Geschwindigkeit. Hier nehmen die erhöhten Geschwindigkeitsfluktuationen einen direkten Einfluss auf die Mischungsgradfluktuationen, indem ein erhöhter konvektiver Transport des Gemisches erfolgt.

Bei der Betrachtung der statistischen Axialprofile, die in Abbildung 7.6 gezeigt sind, bestätigen sich die Erkenntnisse aus den vorher gezeigten Radialprofilen. Bei den mittleren axialen Profilen ist eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zu erkennen. Neben der axialen Geschwindigkeit und dem Mischungsgrad ist hier auch die Temperatur als chemische Größe gezeigt. Bei der mittleren axialen Geschwindigkeit, wie auch bei der mittleren Temperatur, ist eine leichte Unterschätzung der experimentellen Daten zu beobachten. Bei den Fluktuationen bestätigen sich die Abweichungen, die bei den radialen Profilen zu beobachten waren. Auf eine leichte Unterschätzung der Fluktuationen der Geschwindigkeit und des Mischungsgrades im Umfeld der Düse folgt eine leichte Überschätzung nahe $x = 0.25m$. Ganzheitlich betrachtet zeigen die Simulationsergebnisse eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, weshalb es gerechtfertigt ist, die LES als Basis für eine Verbrennungslärberechnung zu verwenden.

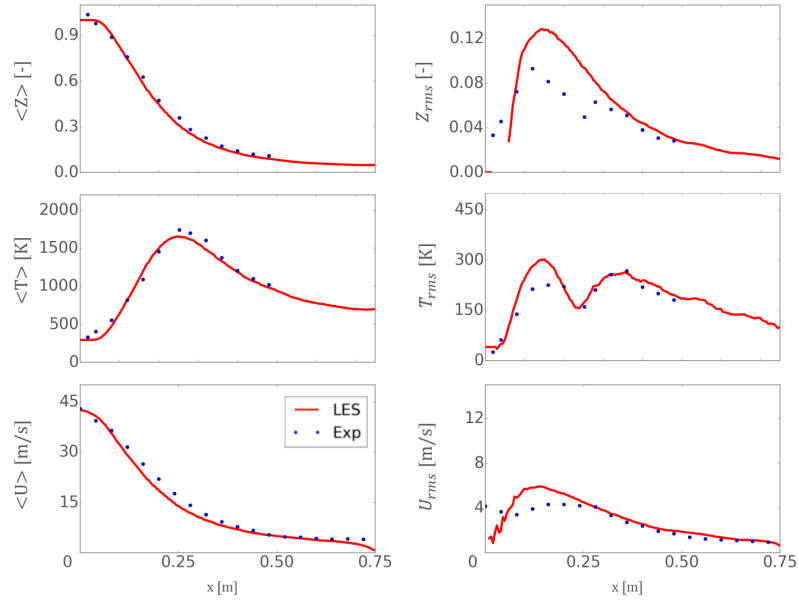


Abbildung 7.6: Vergleich der Simulationsergebnisse mit statistischen Axialprofilen für die H3-Flamme. Gezeigt ist neben dem axialen Verlauf der Geschwindigkeit, die Temperatur, sowie der Mischungsgrad

Thermoakustik

Wie im vorangegangenen Abschnitt gezeigt wurde, ist die LES in der Lage das reagierende Strömungsfeld der frei propagierenden H3-Flamme mit einer hohen Genauigkeit zu simulieren. Bei der verwendeten hybriden LES/CAA-Methode werden in jedem LES Zeitschritt die akustischen Quellterme für die anschließende Akustiksimulation berechnet. Bei der H3-Flamme wurden die akustischen Quellterme nach der vereinfachten Definition (4.46) berechnet. Der vereinfachte thermoakustische Quellterm kann direkt aus der reagierenden LES gewonnen werden und beinhaltet die dominanten thermoakustischen Quellmechanismen des Verbrennungssystems [67, 121, 14]. In Abbildung 7.7 ist das gewonnene Schalldruckfeld der H3-Flamme in einem Schnitt durch die z-Ebene dargestellt. Gut zu erkennen ist die sphärische und symmetrische Wellenausbreitung aus der Reaktionszone, die besonders deutlich im Düsenbereich sichtbar ist. Der Bereich um die Düse ist in einer vergrößerten Darstellung gezeigt. Es fällt auf, dass der Düsenbereich von sehr großen Schalldruckamplituden bzw. akustischen Quelltermen geprägt ist. In diesem Bereich treten sehr große Dichtegradienten auf, weil einerseits der kalte Brennstoffstrom aus der Düse in den heißen Flammenbereich einströmt und andererseits im äußeren Bereich die kalte Sekundärluftströmung mit der an der Düse angelegten sehr dünnen Flamme ebenfalls sehr große räumliche wie zeitliche Dichteänderungen verursacht. Kurz nach der Düse beginnt eine zum Auslass kegelförmig zunehmende Zone, welche infolge der turbulenten Durchmischung der heißen Gase im Abgasstrahl eine stark abfallende akustische Quellstärke aufweist. In diesem Bereich kommt es nicht mehr zu starken zeitlichen Dichteänderungen, welche eine verstärkte akustische Quelle generieren. Diese Beobachtung wird durch die in Abbildung 7.8 dargestellte instationäre Dichteänderung $\partial\rho/\partial t$ bestä-

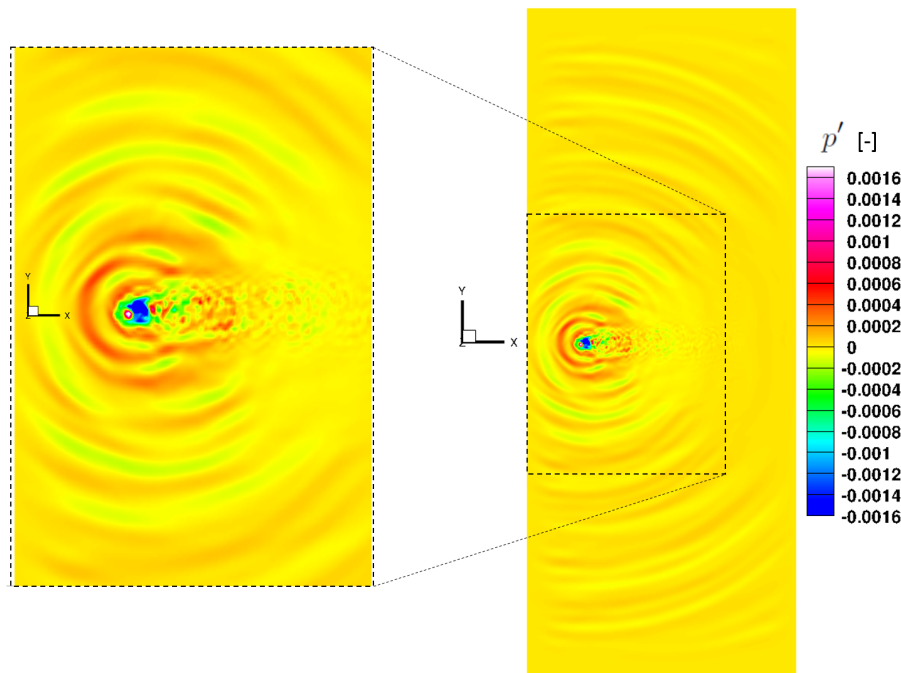


Abbildung 7.7: Normiertes Schalldruckfeld der H3-Flamme mit vergrößert dargestelltem Düsenbereich.

tigt. Hier ist analog zu dem akustischen Feld eine hohe Quellstärke im Düsenbereich zu beobachten. Für die quantitative Bewertung der akustischen Simulationsergebnisse stehen an zahlreichen axialen Positionen spektrale Schallintensitätsmessungen zu Verfügung [12]. Aufgrund der Rotationssymmetrie bei der akustischen Wellenausbreitung kann von einer gleichförmigen Verteilung des Schalldrucks in Umfangsrichtung ausgegangen werden. Für den quantitativen Vergleich der Messergebnisse mit den Simulationsergebnissen wurden 3 axiale Positionen ausgewählt. Die zum Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen verwendeten Messpositionen sind in Abbildung 7.9 blau gekennzeichnet. Die numerischen Daten wurden an den entsprechenden Positionen durch eine spektrale Auswertung der aufgenommenen Zeitreihen erzielt. Hierzu wurden die simulierten Zeitreihen des Schalldrucks mit Hilfe einer FFT-Analyse ausgewertet. Der Vergleich zwischen den Mess- und den Simulationsergebnissen für die drei axialen Positionen ist in Abbildung 7.10 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Simulationsergebnisse in allen drei Messpositionen über den kompletten Frequenzbereich eine Überschätzung im Vergleich zu den experimentellen Daten aufweisen. Der prinzipielle Verlauf der spektralen Intensitätsverteilung sowie der Abfall des Intensitätspegels im höheren Frequenzbereich ist bei den Simulationsergebnissen vergleichbar zu den Messergebnissen. Möglicherweise liegt im Bereich der Düse sowohl in der CFD als auch in der CAA eine gewisse Unterauflösung der numerischen Gitter vor. In diesem Bereich treten extrem hohen Dichtegradienten auf, die infolge einer zu geringen Auflösung mit verstärkter akustischer Quellintensität auf einen räumlich zu großen Bereich verteilt werden und somit einen zu hohen Amplitudenverlauf in den simulierten Ergebnisse wiedergeben.

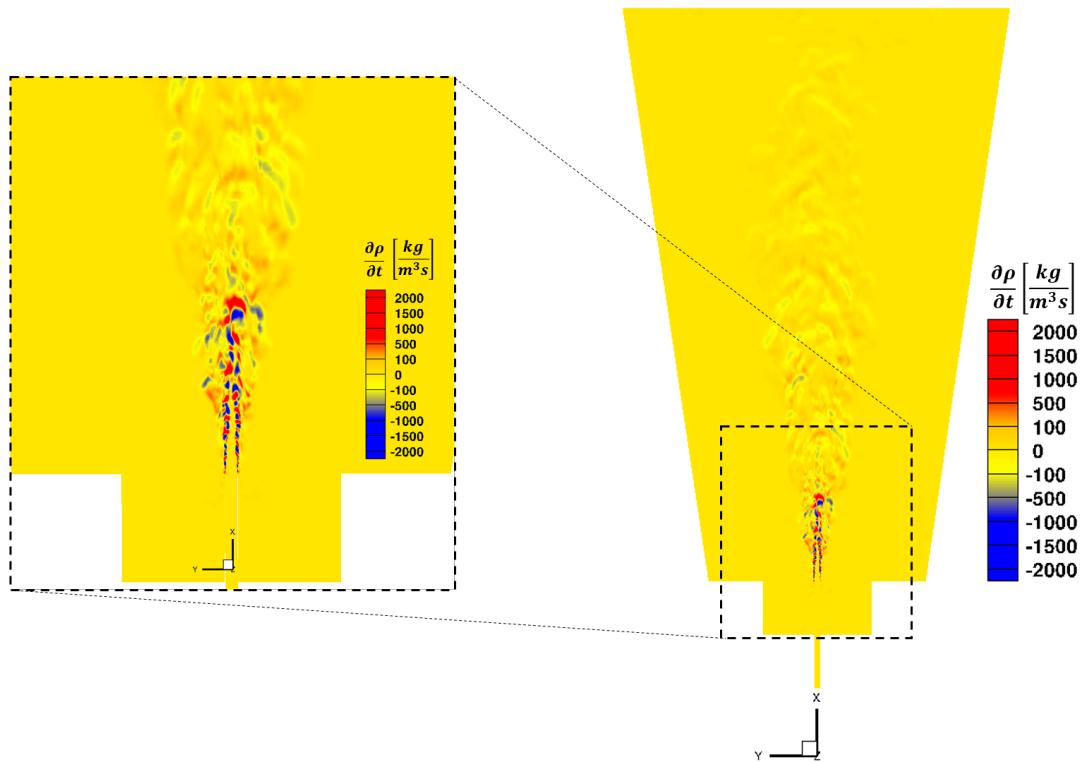


Abbildung 7.8: Momentaufnahme der instationären Dichteänderung $\partial\rho/\partial t$ aus dem reagierenden Strömungsfeld der H3-Flamme.

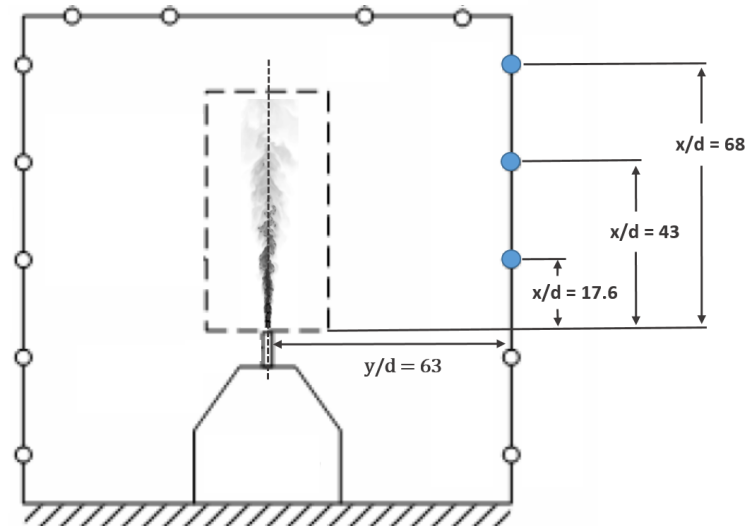


Abbildung 7.9: Darstellung der akustischen Messpositionen. Blau gekennzeichnete Messpositionen werden für den Vergleich mit den numerischen Daten verwendet.

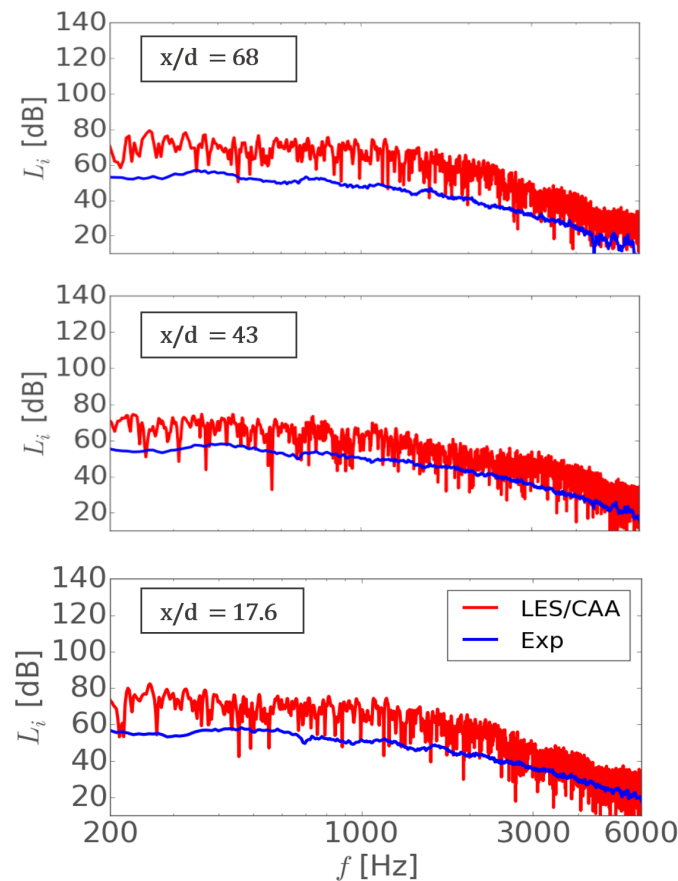


Abbildung 7.10: Vergleich zwischen den experimentell ermittelten spektralen Schallintensitätsverteilungen und den numerischen Ergebnisse der hybriden LES/CAA an unterschiedlichen axialen Messpositionen.

7.1.4 Zusammenfassung

Es wurde eine hybride LES/CAA-Berechnung für die H3-Freistrahlflamme durchgeführt. Die Berechnung der reagierenden Strömung und die akustische Wellenausbreitung wurde in einem simultanen Verfahren ermittelt. Hierzu wurden die Informationen der reagierenden Strömungssimulation mit Hilfe einer Interpolationsroutine an die Akustiksimulation übergeben. Die Bewertung der Simulationsergebnisse der hybriden LES/CAA Berechnung wird in einen strömungsmechanischen und einen akustischen Teil aufgeteilt. Bei der reagierenden Strömungssimulation wurden sehr gute Ergebnisse für die Mittelwerte der axialen Strömungsgeschwindigkeit und den Mischungsgrad erzielt. Bei den Fluktuationen traten im Geschwindigkeitsfeld wie auch bei den chemischen Größen im Vergleich zu den experimentell ermittelten Fluktuationen leichte Abweichungen vom Nahfeld der Düse bis in den mittleren Bereich des Berechnungsgebietes auf. Diese Abweichungen können durch eine zu geringe Auflösung in dem Bereich der sehr dünnen Flammenfront bzw. der sich ausbildenden Scherschicht entstehen. Bei der Akustiksimulation sind Abweichungen zu den experimentellen Daten zu erkennen. Der Intensitätspegel der Akustiksimulation

liegt im kompletten Frequenzbereich oberhalb der gemessenen Werte, besitzt aber einen vergleichbaren Verlauf über den aufgenommenen Frequenzbereich. Dieser Offset in den akustischen Simulationsergebnissen scheint nach den Beobachtungen in den Abbildungen 7.7 und 7.8 im Bereich der Düse zu entstehen. In diesem Bereich werden verstärkte akustische Quellen innerhalb der Flammenzone bzw. Scherschicht generiert, welche zu den erhöhten Amplitudenverläufen führen können.

7.2 Generische Brennkammer

Wie in Kapitel 4.3 erwähnt, werden thermoakustische Instabilitäten über eine komplexe, geometrieabhängige Wechselwirkung von akustischen Schwingungen mit der instationären Wärmefreisetzungsrate hervorgerufen. Bei einer entsprechenden Phasenlage zwischen der Wärmefreisetzungsrate und den vorliegenden akustischen Schwingungen kann es zu einer Verstärkung der Schwingungen kommen. Das Phänomen der thermoakustischen Instabilitäten wird häufig bei stationär wie auch instationär betriebenen Gasturbinenbrennkammern beobachtet, welche aufgrund des hohen Komplexitätsgrades sowie den teilweise enormen geometrischen Abmessungen nur sehr schwer einer experimentellen Untersuchung unterzogen werden können. Selbst numerische Untersuchungen solch komplexer Systeme stellen eine besondere Herausforderung dar und sind mit enormen Kosten verbunden. Aus diesem Grund sind diese für die Entwicklung und Erprobung sowie die Validierung neuer Simulationsmethoden gänzlich ungeeignet. Eine bessere Alternative für die Untersuchung von neuen Simulationsmethoden bieten hier vereinfachte Systeme, welche eine deutlich reduzierte Komplexität aufweisen und dabei die entscheidenden physikalischen Einflussparameter beinhalten, wie in dieser Arbeit eine turbulente und reagierende, räumlich durch Wände begrenzte Strömung. Aus diesem Grund wurde in dieser und in der Arbeit von Klewer [63] eine generische Brennkammer von Chakravarthy et al. [19] zur numerischen Untersuchung thermoakustisch instabiler Betriebsbedingungen verwendet. Diese generische Brennkammer besitzt im Vergleich zu realen Gasturbinenbrennkammern einen reduzierten Komplexitätsgrad und ist somit für die Untersuchung von thermoakustischen Instabilitäten gut geeignet.

Für die Validierung der numerischen Ergebnisse der hybriden LES/CAA stehen experimentell gemessene Daten für das reagierende Strömungsfeld bereit, welche von Shreenivasan [106] mittels *Particle Image Velocimetry* (PIV) vermessen wurden. Für die Beurteilung der akustischen Felder wurden von Chakravarthy et al. [19] mit Hilfe von axial verteilten Mikrofonen Zeitreihen des generierten Schalldrucks aufgenommen. Leider stehen für die Bewertung der strömungsmechanischen Größen keine Fluktuationen oder Messungen von chemische Größen zur Verfügung.

7.2.1 Experimenteller Aufbau

In diesem Kapitel soll der experimentelle Aufbau der generischen Brennkammer an der schematischen Darstellung in Abbildung 7.11 kurz erläutert werden. Die Verbrennung in der Brennkammer erfolgt nach dem Prinzip einer Diffusionsflamme. Die Verbrennungsluft wird getrennt von dem Brennstoff durch das Plenum in die Brennkammer eingeführt. Als Brennstoff wurde bei den Untersuchungen Methan CH_4 verwendet, welches 1mm unterhalb der zurückspringenden Kante durch eine rechteckige Zuführung von 4×4 mm in die Brennkammer einströmt. Die zurückspringende Kante trennt die beiden Brennkammerabschnitte A und B voneinander. Die Mischung der Verbrennungsluft und des Brennstoffes sowie die Verbrennung findet ausschließlich in Abschnitt B statt. Die Abmessungen des Kanalabschnitts A betragen im Querschnitt 30×30 mm² und in der Länge $L_A = 190$ mm. Bei der zurückspringenden Kante erfolgt in Abschnitt B eine Verdoppelung des Querschnitts auf 30×60 mm² und die Länge beträgt bei den in dieser Arbeit verwendeten

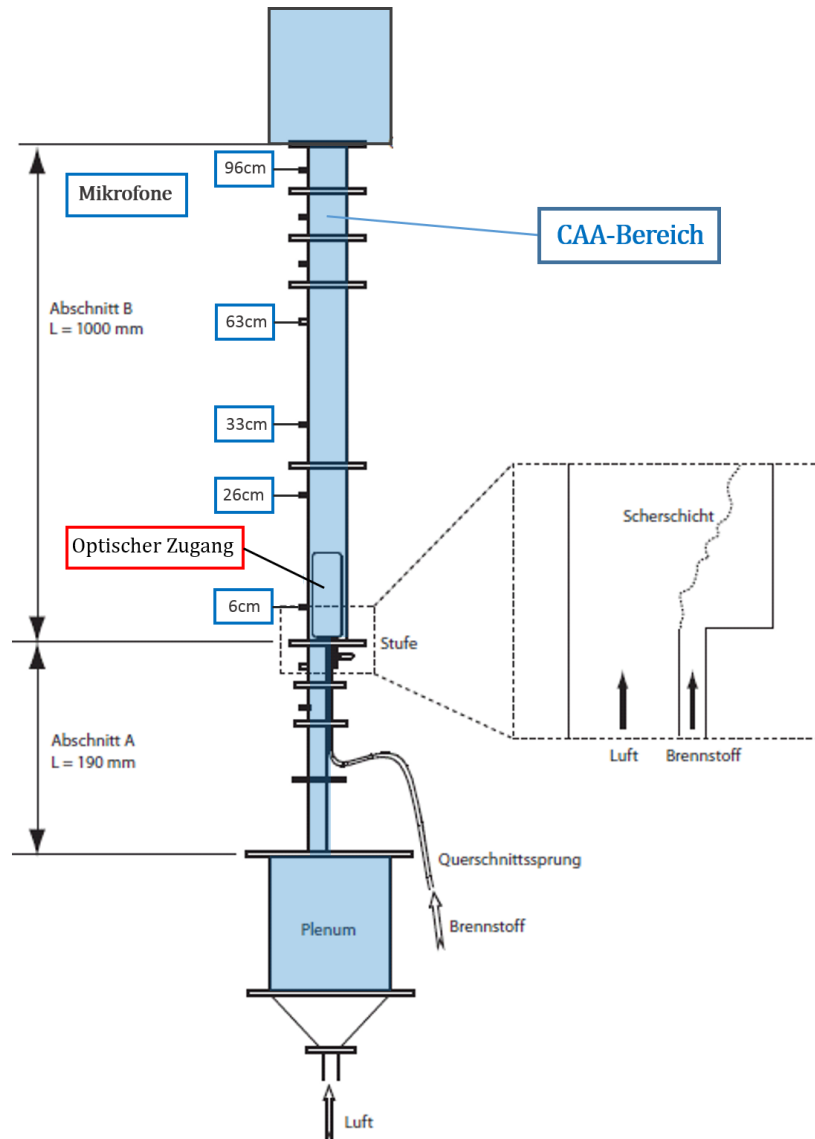


Abbildung 7.11: Darstellung der generischen Brennkammer von Chakravarthy et al [19] mit den zur Validierung verwendeten Mikrofonpositionen. In blau hinterlegt ist der Bereich gekennzeichnet, der für die akustische Simulation verwendet wird.

Konfigurationen $L_B = 1000 \text{ mm}$. Infolge des Querschnittsprungs an der zurückspringenden Kante bildet sich zwischen der Luft- und der Brennstoffströmung eine Scherschicht aus. Durch die Scherschicht und eine sich ausbildende Rezirkulationszone kurz hinter der Stufe wird in diesem Bereich eine gute Durchmischung von Brennstoff- und Verbrennungsluftstrom erzeugt, welches zur Stabilisierung der Flamme in diesem Bereich führt. Am Ende des Kanalabschnittes B erfolgt ein weiterer Querschnittsprung.

Bei den experimentellen Untersuchungen wurden zahlreiche Betriebsbedingungen untersucht, bei denen neben einer Variation der globalen Äquivalenzverhältnisse eine Längenvariation der Brennkammerabschnitte A und B durchgeführt wurde. Die variablen Brennkammerabschnitte sind durch horizontale Trennlinien in Abbildung 7.11 gekennzeichnet.

zeichnet. Durch die Variation der Brennkammerabschnitte wird neben den akustischen Eigenfrequenzen der generischen Brennkammer das thermoakustische Verhalten beeinflusst. Mit einer Längenänderung des Kanalabschnittes A verändern sich die turbulenten Mischungsprozesse nach der Stufe in einem gewissen Maße, da durch die Längenvariation eine Beeinflussung der turbulenten Grenzschichtströmung in diesem Abschnitt hervorgerufen wird, welche einen direkten Einfluss auf die Scherschicht und Rezirkulationszone mit sich bringt und die Reaktionszone mit ihren akustischen Quelltermen beeinflusst. Durch die Variation der zugeführten Verbrennungsluft- und Brennstoffmassenströme wurden unterschiedliche globale Äquivalenzverhältnisse untersucht. Mit einer Massenstromänderung wird das globale Strömungsverhalten in der Brennkammer gänzlich verändert. Die Strömungsgeschwindigkeiten sind direkt mit dem Massenstrom verbunden und beeinflussen somit die Ausbildung der turbulenten Grenzschicht und der Rezirkulationszone sowie die Ablösefrequenz von Wirbeln an der zurückspringenden Kante. Hierdurch wird ein direkter Einfluss auf die Mischung von Verbrennungsluft- und Brennstoffstrom genommen und somit die Verbrennung und die damit verbundene akustische Quelltermgenerierung in der Brennkammer verändert.

Bei den durchgeführten experimentellen Untersuchungen zeigte sich für die in Abbildung 7.11 dargestellten geometrischen Abmessungen bei einer Variation der Betriebsparameter ein thermoakustisch instabiles Betriebsverhalten der generischen Brennkammer. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde dieser instabile Betriebspunkt mit einem stabilen Betriebspunkt bei identischen geometrischen Abmessungen mit Hilfe der entwickelten hybriden LES/CAA-Methode mit unterschiedlichen Rückkopplungsmechanismen simuliert und mit den experimentellen Daten verglichen. Die beiden untersuchten Betriebspunkte unterscheiden sich durch die verwendeten Massenströme. Eine entsprechende Aufstellung der verwendeten Massenströme, Reynoldszahlen Re und resultierenden globalen Äquivalenzverhältnisse für den stabilen und instabilen Brennkammerbetrieb sind in Tabelle 7.1 aufgeführt. Zu erwähnen ist, dass die experimentell bestimmten Massenströme fehlerbe-

Tabelle 7.1: Parameter der thermoakustisch stabilen und instabilen Betriebspunkte der generischen Brennkammer.

| Thermoakustisch stabiler Betriebspunkt | |
|--|----------|
| Brennstoffmassenstrom $\dot{m}_{Br.}$ | 58 mg/s |
| Luftmassenstrom \dot{m}_{Luft} | 8.7 g/s |
| Mittlere Eintrittsgeschwindigkeit \bar{u}_{Luft} | 4 m/s |
| Reynoldszahl Re | 6486 |
| Thermoakustisch instabiler Betriebspunkt | |
| Brennstoffmassenstrom $\dot{m}_{Br.}$ | 85 mg/s |
| Luftmassenstrom \dot{m}_{Luft} | 23.5 g/s |
| Mittlere Eintrittsgeschwindigkeit \bar{u}_{Luft} | 10.8 m/s |
| Reynoldszahl Re | 17513 |

haftet sind, weshalb die Massenströme anhand der experimentellen Ergebnisse abgeschätzt

werden mussten. Die aufgeführten Reynoldszahlen wurden nach der Definition (2.32) mit Hilfe der Stufenhöhe $h = 0.03\text{ m}$, der mittleren Verbrennungsluftgeschwindigkeit \bar{u}_{Luft} und der kinematischen Viskosität der Verbrennungsluft $\nu_{Luft} = 1.85 \cdot 10^{-5}\text{ m}^2/\text{s}$ gebildet. Mit den aufgeführten Massenströmen ergibt sich in beiden Betriebspunkten ein mageres globales Äquivalenzverhältnis.

7.2.2 Numerischer Aufbau

Alle im Folgenden gezeigten Ergebnisse für die generische Brennkammer sind mit dem vorgestellten Strömungslöser PRECISE-UNS erzielt worden, welcher mit dem Akustiklöser PIANO zu einem hybriden LES/CAA-Verfahren gekoppelt wurde. Für die Diskretisierung wurden in PRECISE-UNS Verfahren zweiter Ordnung und in PIANO Verfahren vierter Ordnung eingesetzt. Zur Vermeidung von Oszillationen in den verwendeten Skalargleichungen der reaktiven Strömungssimulation wurde das MinMod-Verfahren angewendet. Die grundsätzliche Vorgehensweise und Details zur allgemeinen Diskretisierung sowie dem numerische Gesamtverfahren der Strömungssimulation sind in Kapitel 5.1 zu finden. Allgemeine Details zu dem Akustiklöser PIANO wurden in Kapitel 5.2 vorgestellt. Im ersten Absatz werden die Details zu dem numerischen Aufbau bei der Strömungssimulation erläutert, gefolgt von der Akustiksimulation im zweiten Absatz.

Für die Abbildung der turbulenten, reagierenden Kanalströmung wurde bei der generischen Brennkammer eine Grobstruktursimulation (LES) durchgeführt, welche zur Bestimmung der turbulenten Feinstrukturspannungen das in Kapitel 2.4.3.2 vorgestellte WALE-Modell zur Ermittlung der Modellkonstante verwendet. Für die laminare wie auch turbulente Schmidt-Zahl wurde in dieser Simulation $S_c = S_{c_t} = 0.7$ angenommen. Für die Abbildung der chemischen Reaktionen wurde die notwendige Chemietabelle mit dem Programm CHEM1D [20] unter Verwendung des GRI-3.0-Reaktionsmechanismus [111] für Methan CH_4 bei Umgebungsbedingungen mit 53 beteiligten Spezies und 325 Elementarreaktionen erzeugt. Für die Modellierung der Methanverbrennung wurde im Kontext der FGM eine erweiterte Reaktionsfortschrittsvariable C gewählt, welche für die Wiedergabe des endlich schnellen Reaktionsfortschritts aus einer Kombination von Kohlendioxid CO_2 , Kohlenmonoxid CO besteht. Durch die Abbildung der endlich schnellen Chemie bei der FGM kann die hinter der zurückspringenden Kante abgehobene Flamme korrekt wiedergegeben werden. Bei dem verwendeten Ansatz der tabellierten Chemie wurde für die Abbildung der Turbulenz-Chemie-Interaktion ebenfalls der Presumed-PDF-Ansatz aus Kapitel 3.3.1.4 gewählt. Hierbei wurde für die Reaktionsfortschrittsvariable eine δ -PDF und für den Mischungsgrad eine β -PDF als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion verwendet. Die Chemietabelle enthält für den Mischungsgrad 400 und für die Abbildung des Reaktionsfortschritts 50 Stützstellen. Die Varianzen der beiden Variablen wurden mit jeweils 15 Stützstellen abgebildet. Bei der Generierung der Chemietabelle wurde die Annahme gleicher Diffusionsgeschwindigkeiten ($Le = 1$) zugrunde gelegt, da der turbulente im Vergleich zum molekularen Transport überwiegt.

Für die räumliche Abbildung der Problemgeometrie wurde für die Strömungssimulation eine aus Hexaedern bestehende räumliche, dreidimensionale Diskretisierung des Rechengebietes vorgenommen. Die erzeugten blockstrukturierten numerischen Gitter bestehen aus 2.2 und 3 Millionen Kontrollvolumen und die räumliche Auflösung wurde im Bereich der

zurückspringenden Kante mit der Brennstoffzufuhr verfeinert, um die Reaktionszone und die Wirbelgenerierung in der sich ausbildenden Scherschicht wiedergeben zu können. Eine Darstellung des numerischen Gitters mit 2.2 Millionen Kontrollvolumen ist in Abbildung 7.12 gezeigt. Die Länge des Kanalabschnittes B der generischen Brennkammergeometrie

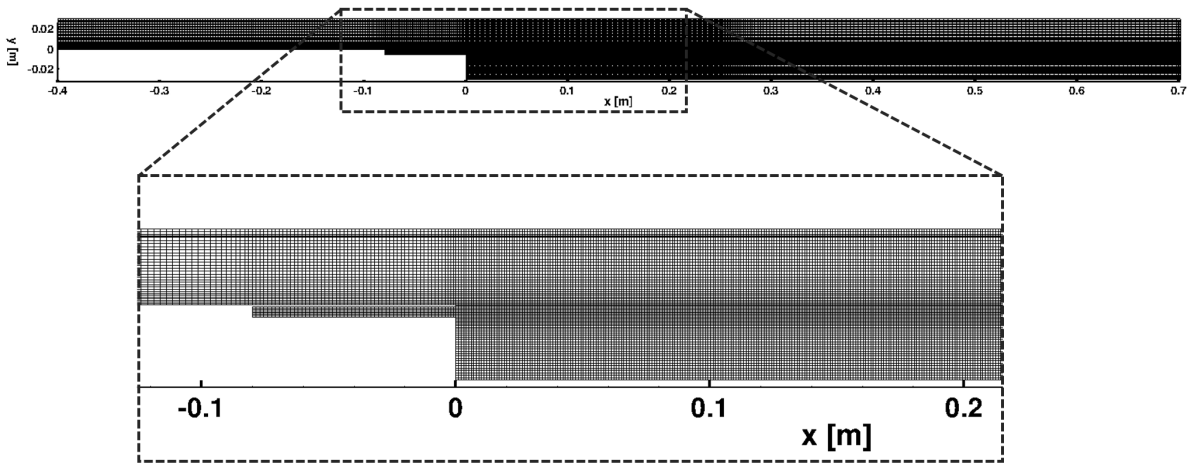


Abbildung 7.12: Schematische Darstellung des numerischen CFD-Gitters der generischen Brennkammer.

wurde in der Strömungssimulation auf $L_B = 700\text{mm}$ verkürzt. Der Einlaufkanal wurde auf $L_A = 400\text{mm}$ verlängert, um eine ausgebildete turbulente Kanalströmung zu erhalten. An den Eintrittsrandbedingungen der Luft- und Brennstoffzufuhr wurde zusätzliche eine turbulente Randbedingung verwendet, um eine turbulente Kanalströmung zu generieren. An der Austrittsfläche des Rechengebietes wurde eine Nullgradientenbedingung angewendet. An den Brennkammerwände gilt die Haftbedingung $u_i = 0$.

Tabelle 7.2: Daten der verwendeten numerischen Gitter.

| Verfahren | Gitterzellen | Δx [mm] | Δy [mm] | Δz [mm] |
|-----------|--------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| CFD | 2.2 mio | 1 - 4 | 0.5 - 1 | 0.5 - 1 |
| CFD | 3 mio | 0.5 - 2.5 | 0.5 - 1 | 0.5 - 1 |
| CAA | 2 mio | 2 | 2 | 2 |

Für die Akustiksimulation der generischen Brennkammer wurde ein separates dreidimensionales, numerisches Gitter erzeugt. Eine schematische Darstellung der verwendeten Abmessungen ist in Abbildung 7.11 bläulich hinterlegt. Die Abmessungen des Rechengebietes sind identisch mit denen im experimentellen Aufbau. Das generierte numerische Gitter besteht aus 108 blockstrukturierten Blöcken. In PIANO wurde bei der Akustiksimulation das DRP-Verfahren [118] vierter Ordnung angewendet. Um ein glattes Gitter zu gewährleisten, wurde die räumliche Diskretisierung des Rechengebietes in alle Raumrichtungen mit einem äquidistanten Gitterabstand von $\Delta_{xyz} = 2\text{mm}$ durchgeführt. Das

Rechengebiet wurde an den Eintritt- und Austrittsflächen mit akustisch nicht reflektierenden Abstrahlrandbedingungen [118] abgeschlossen. An den Wänden wurde die in Kapitel 5.2.3 vorgestellte Ghost-Point-Concept Wandrandbedingung von [119] verwendet. Das für die Akustiksimulation verwendete numerische Gitter ist schematisch in Abbildung 7.13 dargestellt. Bei der Akustiksimulation sind, ähnlich wie bei der Strömungssimulation,

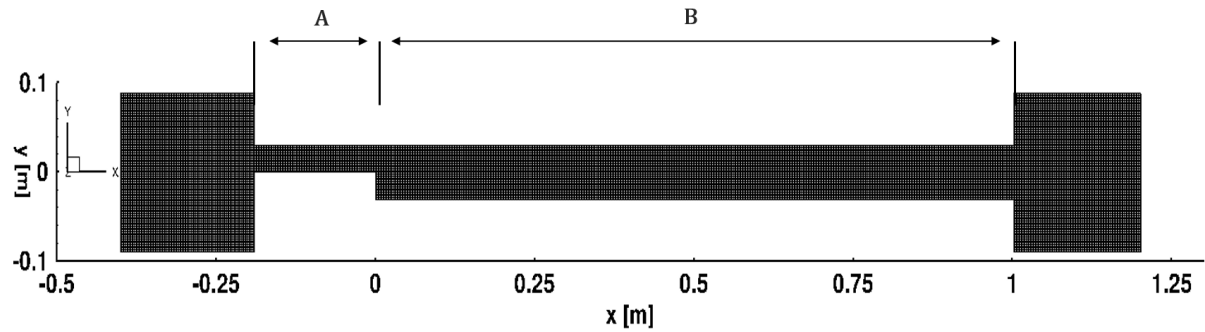


Abbildung 7.13: Schematische Darstellung des numerischen CAA-Gitters der generischen Brennkammer.

Auflösungs- und Stabilitätsgrenzen einzuhalten. Die globale CFL-Zahl war in den Strömungssimulationen stets unterhalb von 1 gehalten worden. Eine Zusammenstellung der berechneten Konfigurationen mit den dabei verwendeten Zeitschrittweiten, Gitterauflösungen und Kopplungsmechanismen ist in Tabelle 7.3 zu finden.

Tabelle 7.3: Simulationsparameter der berechneten Konfigurationen.

| Kopplung | | Betriebspunkt | CFD-Gitter | Δt_{CFD} | CAA-Gitter | Subschritte |
|----------|----------------------------|---------------|------------|------------------|------------|-------------|
| 1-Weg | - | stabil | 2 mio | $8e^{-6}s$ | 2 mio | 20 |
| 2-Weg | $\partial p'/\partial x_i$ | stabil | 2 mio | $4e^{-6}s$ | 2 mio | 8 |
| 1-Weg | - | instabil | 3 mio | $5e^{-6}s$ | 2 mio | 12 |
| 2-Weg | $\partial p'/\partial x_i$ | instabil | 3 mio | $1e^{-6}s$ | 2 mio | 3 |
| 2-Weg | Inletforcing | instabil | 3 mio | $1e^{-6}s$ | 2 mio | 3 |

Die räumliche Auflösung in der Akustiksimulation ermöglicht unter Beachtung der im DRP-Verfahren üblichen Frequenzauflösungsgrenze von 7 Punkten pro Wellenlänge und einer abgeschätzten Schallgeschwindigkeit von $a = 800 \text{ m/s}$ eine räumliche Frequenzauflösung von $f_{max} \approx 28 \text{ kHz}$. Die zeitabhängige Auflösung liegt bei der größten Zeitschrittweite in der Akustiksimulation oberhalb der räumlichen Frequenzauflösung. Für eine zeitliche Stabilisierung der numerischen Akustiksimulation mussten an den Ecken der Querschnittssprünge an Ein- und Auslass künstliche Dämpfungspots eingefügt werden, da aus diesen Bereichen nach einer gewissen Simulationszeit numerische Instabilitäten entstanden.

7.2.3 Ergebnisse der hybriden LES/CAA Simulationen

In den folgenden Kapiteln werden die Simulationsergebnisse der hybriden LES/CAA-Methode präsentiert. Es erfolgt eine Unterteilung nach den Simulationen des stabilen und instabilen Betriebsverhaltens der generischen Brennkammer. Hierbei werden jeweils die Ergebnisse der reagierenden Strömungssimulation einer qualitativen Beurteilung unterzogen, auf die im Anschluss ein quantitativer Vergleich anhand der Mittelwerte der Axialgeschwindigkeiten mit experimentellen Daten an 5 axialen Positionen erfolgt. Nach der Bewertung der reagierenden Strömung werden die akustischen Ergebnisse an den in Abbildung 7.11 gezeigten Mikrofonpositionen verglichen.

7.2.4 Thermoakustisch stabiler Fall

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der hybriden LES/CAA-Methode für den stabilen Betriebspunkt vorgestellt. Die erzielten Simulationsergebnisse wurden alle von einer quasi stationären Startlösung des reagierenden Strömungsfeldes begonnen, um eine bessere Vergleichbarkeit zwischen den gezeigten Vorgehensweisen zu erhalten. Wie in Tabelle 7.3 dargestellt, wurden alle Simulationen des stabilen Betriebspunktes mit jeweils identischem Gitter und variierenden Zeitschrittweiten durchgeführt.

Reagierende Strömung

In Abbildung 7.14 sind Momentaufnahmen einer hybriden 2-Wege-LES/CAA Simulation dargestellt. Wie eingangs erwähnt wurde der Einlaufkanal entsprechend verlängert, um mit der angewendeten turbulenten Eintrittsrandbedingung im Bereich der zurückspringenden Kante eine voll ausgeprägte turbulente Kanalströmung vorliegen zu haben. Anhand der in Abbildung 7.14 gezeigten Momentaufnahme der Axialgeschwindigkeit ist zu erkennen, dass bereits kurz nach dem Einlass der Verbrennungsluft eine turbulente Strömungsbewegung sowie eine gewisse Ausbildung einer Wandgrenzschicht zu beobachten ist. Nach dem Querschnittsprung ist unterhalb der austretenden Brennstoffströmung ein sogenanntes Todwassergebiet zu erkennen, welches sich zwischen der Bewandung und der im Bereich von $x = 0.1\text{ m}$ entstehenden Rezirkulationszone ausbildet. Anhand der Momentaufnahme der Temperatur ist zu erkennen, dass die Rezirkulationszone heißes Abgas in diese Zone befördert, wodurch eine stabile Zündung des Frischgases unterstützt wird. Mit Hilfe der mittleren Darstellung in Abbildung 7.14 kann ein Eindruck über die Verteilung der instationären Dichteänderung gewonnen werden, welche direkt in den thermoakustischen Quellterm eingeht. Hier ist zu erkennen, dass die akustische Quelltermverteilung im Bereich zwischen der Stufe und $x = 0.3\text{ m}$ ihr Maximum erreicht. Zum Auslass hin fällt diese sukzessive ab, weshalb eine Verkürzung des numerischen Gitters in der Strömungssimulation gerechtfertigt ist.

Zur Validierung der Ergebnisse der hybriden Strömungssimulationen liegen experimentell erzielte statistische Profile der Axialgeschwindigkeit an 5 axialen Positionen nach dem Querschnittsprung vor. Leider stehen zum Vergleich nur die statistischen Mittelwerte der Axialgeschwindigkeit bereit. Informationen über skalare Größen oder Fluktuationen sind nicht vorhanden. In Abbildung 7.15 ist die Gegenüberstellung der experimentellen und

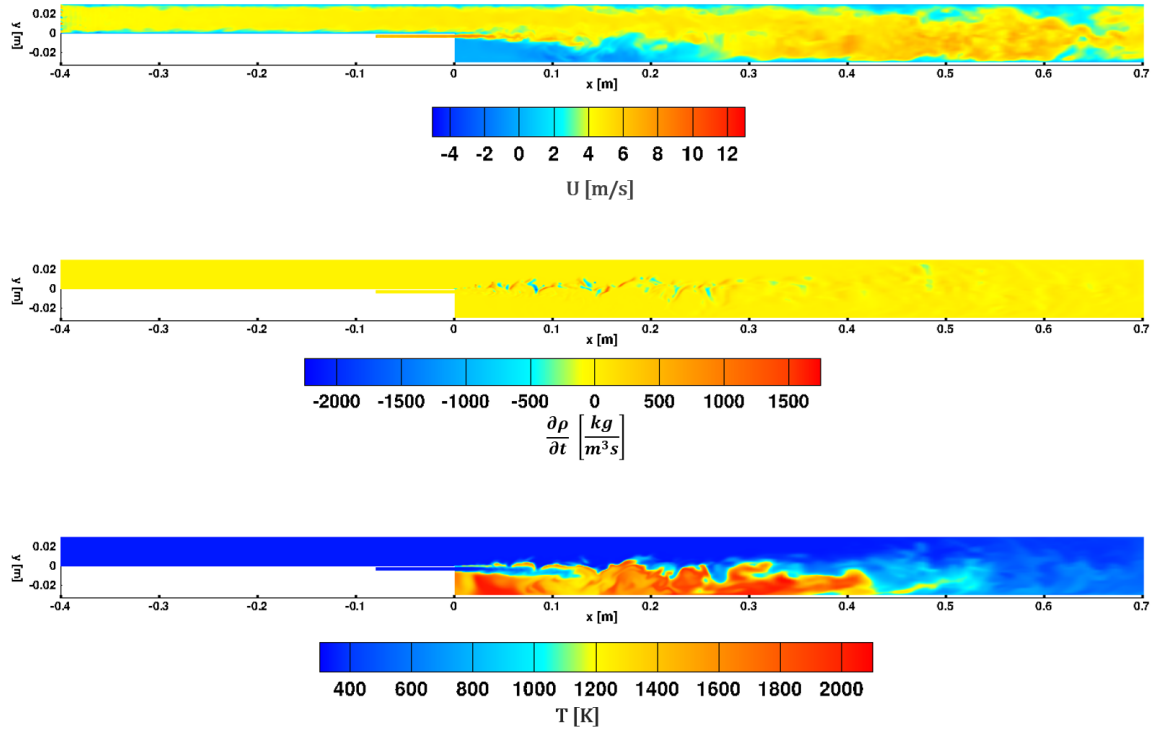


Abbildung 7.14: Qualitativer Vergleich der reagierenden Strömungssimulation für den stabilen Betriebspunkt mit 2-Wege Rückkopplung. Dargestellt sind Momentaufnahmen der Axialgeschwindigkeit (oben), der instationären Dichteänderung (mitte) und der Temperatur (unten).

numerischen Ergebnisse an den 5 axialen Positionen nach der zurückspringenden Kante gezeigt. Es wird ein Vergleich zwischen den hybriden LES/CAA Simulation für die 1-Wege und 2-Wege Kopplung und den experimentellen Daten dargestellt. Die Ergebnisse der 2-Wege Kopplung wurden mit der in Kapitel 5.3.2 vorgestellten Rückkopplung eines Schwankungsdruckgradienten in die Strömungssimulation erzielt. In den ersten beiden unteren Messebenen bei $x = 20/40\text{ mm}$ in Abbildung 7.15 ist eine Unterschätzung der mittleren Geschwindigkeiten im oberen Kanalabschnitt zu erkennen. Für die Simulation mit Rückkopplung fällt diese Unterschätzung im Vergleich zu der Simulation ohne Rückkopplung etwas stärker aus. Eine ähnliche Beobachtung liegt im unteren Bereich des Kanals vor. Hier liegt durch die Rezirkulation eine negative Geschwindigkeit von heißem Gas vor, welche von der Simulation mit Rückkopplung wiederum schlechter vorhergesagt wird. Der in der Kanalmitte eintretende Brennstoffstrom wird von beiden Simulationen in seinen Maximalwerten gut getroffen. In nahezu allen Ebenen ist bei beiden Simulationen im Bereich von $y/h = 0$ eine starke Geschwindigkeitsverringern im Vergleich zu den Experimenten zu beobachten. Vermutlich resultiert diese Schwankung aus der nicht ausreichend aufgelösten Grenzschichtströmung im Einlasskanal, welche einen starken Einfluss auf die Scherschicht nach dem Querschnittssprung bewirkt. Ähnliche Beobachtungen sind bei vorangegangenen Simulationen der generischen Brennkammer gemacht worden [63]. In den letzten drei Messebenen $x = 60/80/100\text{ mm}$ wird eine deutliche Verbesserung

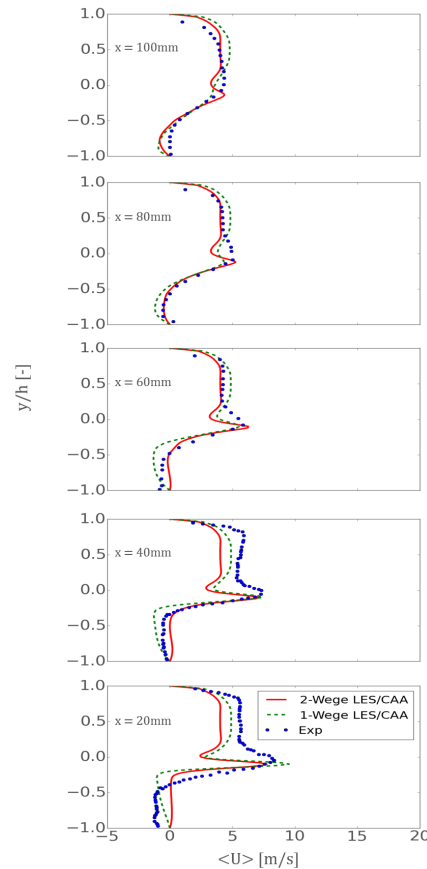


Abbildung 7.15: Quantitativer Vergleich der Ergebnisse der reagierenden Strömungssimulation mit statischen Axialgeschwindigkeitsprofilen für die stabilen Betriebsbedingungen an den 5 axialen Messpositionen. Aufgetragen ist der Mittelwert der Geschwindigkeit über der mit der Stufenhöhe normierten y -Koordinate.

beim Vergleich der Ergebnisse erzielt. Hier wird bei der hybriden 2-Wege Simulation eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten erreicht, wohingegen die 1-Wege Simulation zu einer Überschätzung der Geschwindigkeiten neigt. Wie schon erwähnt liegen leider keine experimentellen Daten von skalaren Größen wie dem Mischungsgrad, der Temperaturverteilung oder im allgemeinen von Fluktuationen vor. Anhand dieser könnte eine näherliegende Bewertung der Simulationsergebnisse getroffen werden und möglicherweise eine schlüssigere Erklärung für die Abweichungen in den ersten Ebenen gegeben werden.

Thermoakustik

In diesem Kapitel werden die akustischen Ergebnisse der hybriden LES/CAA Berechnungen der 1-Wege und 2-Wege Kopplung mit experimentellen Daten an 5 axialen Mikrofonpositionen verglichen. In Abbildung 7.16 ist eine Momentaufnahme des normierten Schalldruckfeldes für die hybride 2-Wege LES/CAA dargestellt. Gut zu erkennen ist die akustische Wellenbewegung hin zu Ein- und Auslassflächen mit einem sphärischen Aus-

breitungsmuster an den Querschnittsprüngen. Für den quantitativen Vergleich der nume-

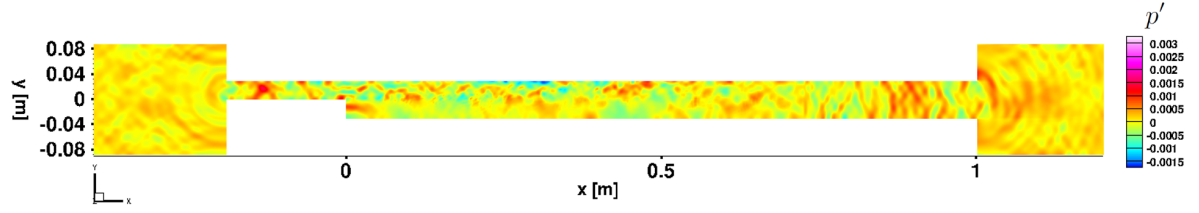


Abbildung 7.16: Momentaufnahme der akustischen Wellenausbreitung für den stabilen Betriebspunkt. Dargestellt ist das akustische Feld des normierten Schalldruck für die hybride 2-Wege LES/CAA.

rischen mit den experimentellen Daten wurden die Zeitreihen der Schalldruckamplituden aus den numerischen Simulationen mit Hilfe einer FFT-Analyse ausgewertet. In Abbildung 7.17 sind die Ergebnisse der Akustiksimulationen im Vergleich zu den experimentell ermittelten Spektren dargestellt. Die Ergebnisse der 1-Wege und 2-Wege Kopplung zeigen in allen Ebenen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

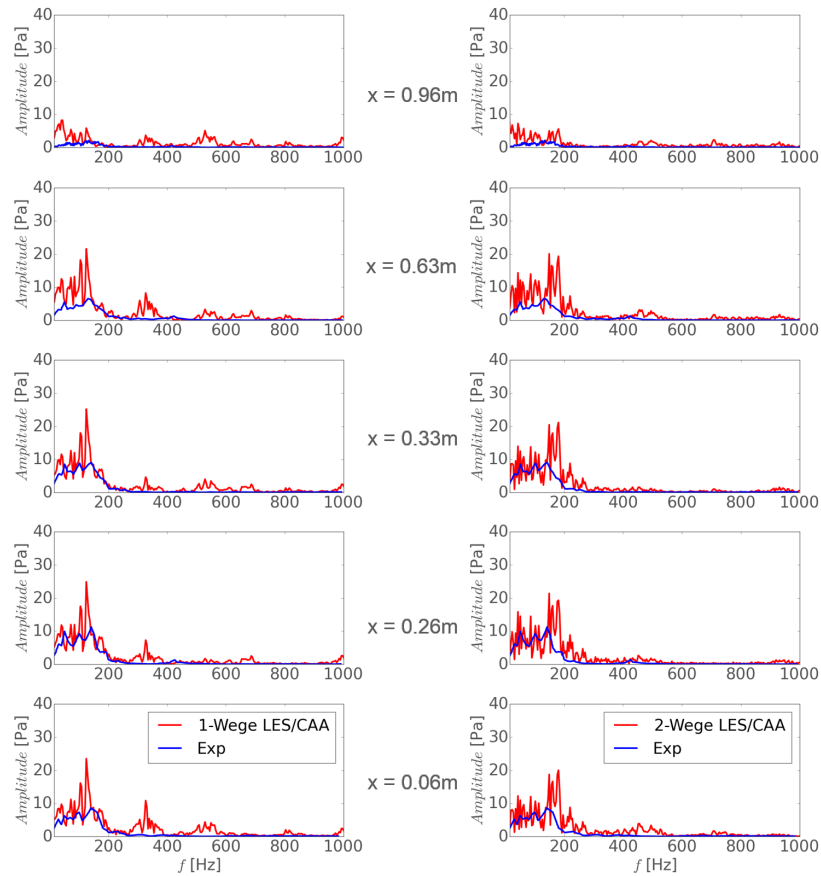


Abbildung 7.17: Vergleich der CAA Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten für die 1-Wege Kopplung (links) und für die 2-Wege Kopplung unter Verwendung des zurückgekoppelten Druckgradienten $\partial p' / \partial x_i$ (rechts) an den 5 axialen Mikrofonpositionen.

Die dominanten Frequenzen treten in einem Frequenzbereich zwischen $f = 0\text{ Hz}$ und $f < 200\text{ Hz}$ auf und werden von den numerischen Berechnungen bestätigt. Es ist zu erkennen, dass beide Methoden eine leichte Überschätzung der Schalldruckamplituden wiedergeben, jedoch beide von den Schalldruckamplituden vergleichbare Ergebnisse liefern, was im Fall der stabilen Betriebsbedingungen so zu erwarten ist. Die Systemeigenfrequenzen der longitudinalen Schwingungsmoden der generischen Brennkammer befinden sich im Bereich zwischen $f \approx 50 - 170\text{ Hz}$ und werden durch das Experiment sowie die numerische Berechnung korrekt identifiziert. Im Frequenzbereich um 350 Hz zeigt die Berechnung mit der 1-Wege Kopplung eine erhöhte Schalldruckamplitude, welche bei den Experimenten und der Berechnung mit der 2-Wege Kopplung nicht vorkommen. Dies deutet auf die verstärkte Wiedergabe einer höheren harmonischen Schwingungsmode hin.

7.2.5 Zusammenfassung

Für die Simulation des stabilen Betriebspunktes wurden für das reagierende Strömungsfeld befriedigende Ergebnisse erzielt. Hierbei ist wiederum die Tatsache zu nennen, dass die Massenströme aus den Experimenten fehlerbehaftet sind und für die hier durchgeführte Simulation abgeschätzt werden mussten. Die Wiedergabe der Strömungsgeschwindigkeit wurde in den ersten Ebenen von der hybriden 2-Wege LES/CAA etwas schlechter wiedergegeben als von der Berechnung ohne die Rückkopplung eines akustischen Druckgradienten. In den folgenden Ebenen wurde eine bessere Vorhersage mit der Rückkopplung des akustischen Druckgradienten erzielt. Für das reagierende Strömungsfeld wären zusätzliche Indikatoren wie skalare Größen und Fluktuationen zur erweiterten Bewertung der reagierenden Strömung wünschenswert. Trotz der Abweichungen bei der Vorhersage des reagierenden Strömungsfeldes wurden in der Akustiksimulation gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Schalldruckmessungen erzielt. Die Frequenzinformationen wurden sehr gut wiedergegeben. Lediglich bei den Amplituden wurden leichte Überschätzungen berechnet. Hier lagen die Amplituden der 2-Wege Simulation leicht unter denen der 1-Wege Berechnung. In beiden Simulationen wurde eine Zeitspanne von $t = 0.25\text{ s}$ berechnet. Bei den Berechnungen des stabilen Betriebspunktes der generischen Brennkammer wurden sowohl mit der 1-Wege als auch mit der 2-Wege Kopplung der vorgestellten hybriden LES/CAA-Methode abgesehen von den befriedigenden Ergebnissen der reagierenden Strömung sehr gute Ergebnisse für die Vorhersage der akustischen Eigenschaften erzielt. Hierdurch wird die Fähigkeit der vorgestellten Methode zur Berechnung des thermoakustischen Verhaltens von technischen Verbrennungssystemen bestätigt.

7.2.6 Thermoakustisch instabiler Fall

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse für den instabilen Betriebspunkt der generischen Brennkammer vorgestellt und wie im letzten Kapitel mit experimentellen Daten sowohl für das reagierende Strömungsfeld als auch für das akustische Schalldruckfeld verglichen. Die erzielten Simulationsergebnisse wurden alle von einer quasi stationären Startlösung des reagierenden Strömungsfeldes begonnen, um eine bessere Vergleichbarkeit zwischen den gezeigten Vorgehensweisen zu erhalten. Wie in Tabelle 7.3 dargestellt, wurden für

den instabilen Betriebspunkt neben der Rückkopplung eines akustischen Druckgradienten in die Strömungssimulation eine akustischen Beeinflussung der Einlassmassenströme untersucht.

Reagierende Strömung

In Abbildung 7.18 sind Momentaufnahmen der reagierenden Strömung aus einer hybriden 2-Wege LES/CAA für den instabilen Betriebspunkt der generischen Brennkammer gezeigt. Im Vergleich zu der Abbildung 7.14 des Strömungsfeldes am stabilen Betriebspunkt fällt im instabilen Betriebspunkt die deutlich höhere Strömungsgeschwindigkeit der Verbrennungsluftströmung auf. Desweiteren ist die Reaktionszone im instabilen deutlich kürzer als im stabilen Betriebspunkt. Augenscheinlich scheint auch die instationäre Dichteänderung betragsmäßig größer zu sein, was jedoch durch die unterschiedlichen Zeitschrittweiten der Simulationen der stabilen und instabilen Betriebspunkte verfälscht wird. Ein markantes Detail, welches bei der Darstellung der Temperatur in Abbildung 7.18 für

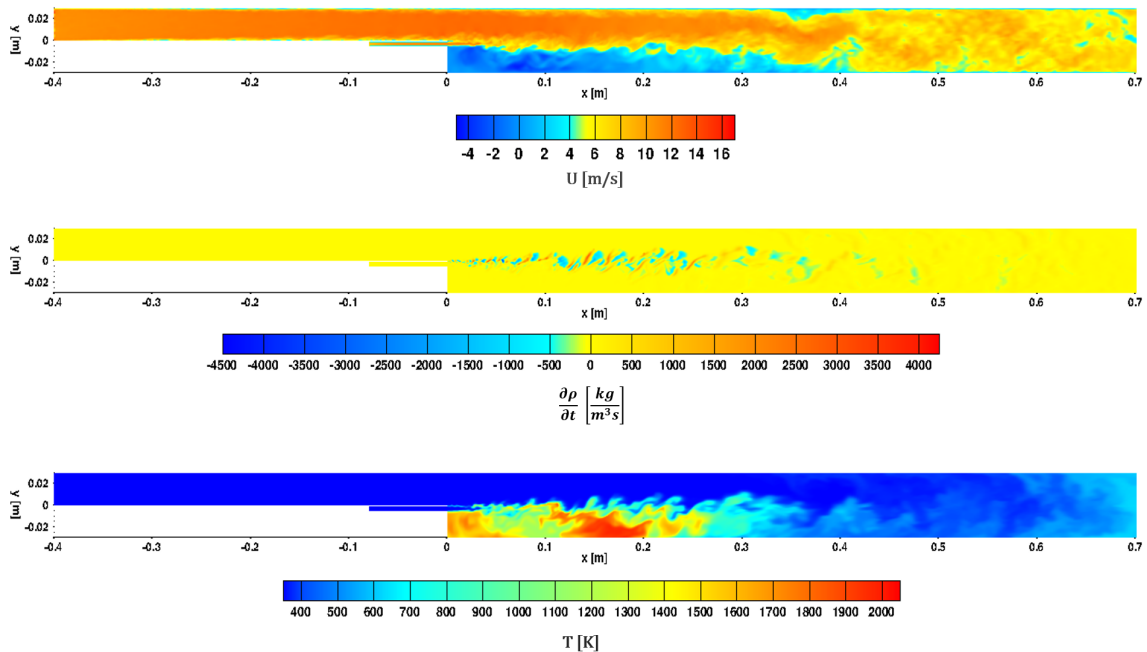


Abbildung 7.18: Qualitativer Vergleich der reagierenden Strömungssimulation für den instabilen Betriebspunkt mit 2-Wege Rückkopplung. Dargestellt sind Momentaufnahmen der Axialgeschwindigkeit (oben), der instationären Dichteänderung (mitte) und der Temperatur (unten).

den instabilen Betriebspunkt zu beobachten ist, sind die sich kohärent, wellenförmig ausbildenden Heißgastaschen an der Grenze der Scherschicht in Richtung der Verbrennungsluftströmung im oberen Kanalabschnitt. Wie in Abbildung 7.19 vergrößert dargestellt, werden diese hydrodynamischen Instabilitäten zu Beginn der Scherschicht an der zurückspringenden Kante mit einer geschwindigkeitsabhängigen Wirbelablösefrequenz initiiert und wachsen im Verlaufe der Zeit zu Heißgaspaketen an, welche eine verstärkte akustische Quelle darstellen und eine treibende Kraft für die Entstehung von thermoakustischen

Instabilitäten darstellen. In Abbildung 7.20 werden die simulierten axialen Strömungsge-

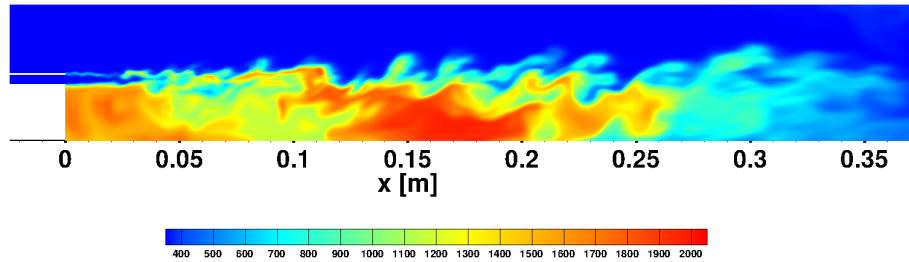


Abbildung 7.19: Vergrößerte Darstellung der Momentaufnahme der Temperaturverteilung im Bereich der zurückspringenden Kante.

schwindigkeiten der hybriden 1-Wege und 2-Wege LES/CAA Berechnungen mit experimentellen statistischen Axialgeschwindigkeitsprofilen an 5 axialen Positionen verglichen. Es sei erwähnt, dass auch die Massenströme der instabilen Betriebspunkte abgeschätzt wurden. Es ist zu erkennen, dass für den instabilen Betriebspunkt eine deutlich bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten erzielt werden konnte.

Problematisch sind wiederum die ersten beiden Messebenen $x = 20/40 \text{ mm}$ nahe der zurückspringenden Kante. Zu erkennen ist, dass die mittleren Geschwindigkeiten der 1-Wege und 2-Wege Kopplung bis auf einen kleinen Unterschied in der oberen Kanalhälfte identisch sind. In den ersten beiden Messebenen kann in Analogie zu den Ergebnissen des stabilen Betriebspunktes eine Unterschätzung der mittleren Axialgeschwindigkeit in der oberen Kanalhälfte beobachtet werden, wohingegen in der unteren Kanalhälfte die Geschwindigkeiten in der Rezirkulationszone unterschätzt werden. In den letzten drei Messebenen besteht zwischen den experimentellen Axialgeschwindigkeitsprofilen und den simulierten Geschwindigkeiten der hybriden 1-Wege und 2-Wege LES/CAA Berechnungen eine sehr gute Übereinstimmung. Lediglich im unteren viertel des Kanals werden die Geschwindigkeiten in der Rezirkulationszone zu niedrig vorhergesagt. Hier zeigt die hybride 2-Wege Simulation leicht bessere Ergebnisse als die Simulation mit 1-Wege Kopplung.

Thermoakustik

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der hybriden LES/CAA Berechnungen für den instabilen Betriebspunkt der generischen Brennkammer gezeigt. Die Simulationsergebnisse werden anhand von experimentellen Schalldruckmessungen an 5 axialen Positionen validiert. Hierbei sollen die Berechnungen der 1-Wege Kopplung mit 2 verschiedenen Methoden der 2-Wege Kopplung verglichen werden. Die 2-Wege Kopplungsmethoden zwischen der CFD und der CAA wurden in Kapitel 5.3.2 und 5.3.2 vorgestellt. In Abbildung 7.21 ist der Vergleich zwischen den Simulationsergebnissen und den experimentellen Schalldruckspektren dargestellt. Anhand der experimentellen Daten kann eine dominierende Frequenz bei $f = 126 \text{ Hz}$ beobachtet werden. In der linken Spalte ist der Vergleich zwischen der hybriden 1-Wege LES/CAA Simulation, welche in dieser Arbeit durchgeführt wurde, und den experimentellen Daten gezeigt. Zusätzlich werden diese Ergebnisse mit

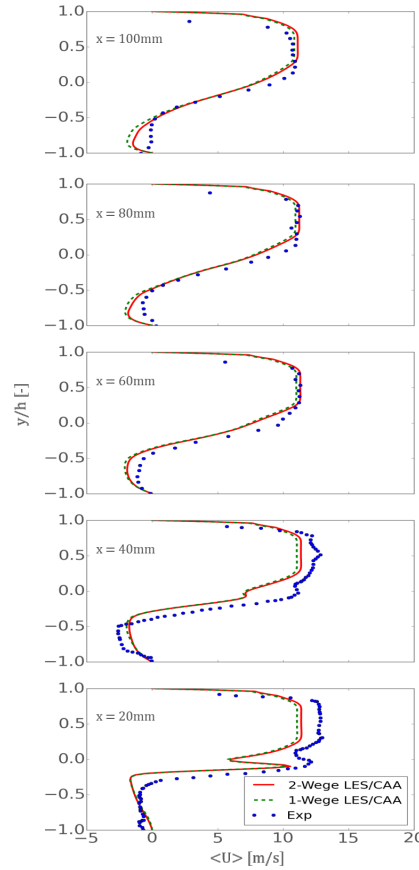


Abbildung 7.20: Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen gemessenen und gemittelten Axialprofilen für die instabilen Betriebsbedingungen

LES/CAA Simulationsergebnissen aus der Arbeit von Klewer [63] verglichen. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Ergebnisse aus den 1-Wege Berechnungen die experimentellen Schalldruckpegel deutlich unterschätzen. Die grundlegenden Frequenzinformationen des instabilen Betriebspunktes der generischen Brennkammer wurden mit der 1-Wege Simulation teilweise erfasst. Unterhalb der dominanten Frequenz von $f = 126 \text{ Hz}$ werden die Amplituden in den Messergebnissen nicht wiedergegeben. Es zeigt sich, dass eine Beeinflussung der reagierenden Strömung mit dieser Vorgehensweise nicht abgebildet werden kann. Lediglich durch die Wirbelablösefrequenz an der zurückspringenden Kante kann ein thermoakustischer Quellterm erzeugt werden, der die Eigenfrequenzcharakteristik der generischen Brennkammer trifft. In der mittleren Spalte sind die Ergebnisse der hybriden 2-Wege LES/CAA Methode gezeigt, welche zur Rückkopplung der akustischen Eigenschaften in das reagierende Strömungsfeld eine Modulation der Eintrittsmassenströme vornimmt. Diese Modulation erfolgt durch eine Überlagerung der Schallschnelle u'_i auf die Eintrittsgeschwindigkeiten, wie in Kapitel 5.3.2 beschrieben wurde. Leider konnte mit dieser Methode kein stabiler Simulationsdurchlauf erzielt werden, was in den Ergebnissen zu erkennen ist. Die dargestellten Ergebnisse wurden nach einer Simulationszeit von $t = 0.095 \text{ s}$ generiert. Tendenziell ist zu erkennen, dass die akustischen Amplituden über denen der Berechnungen ohne Rückkopplung von akustischen Eigenschaften liegen.

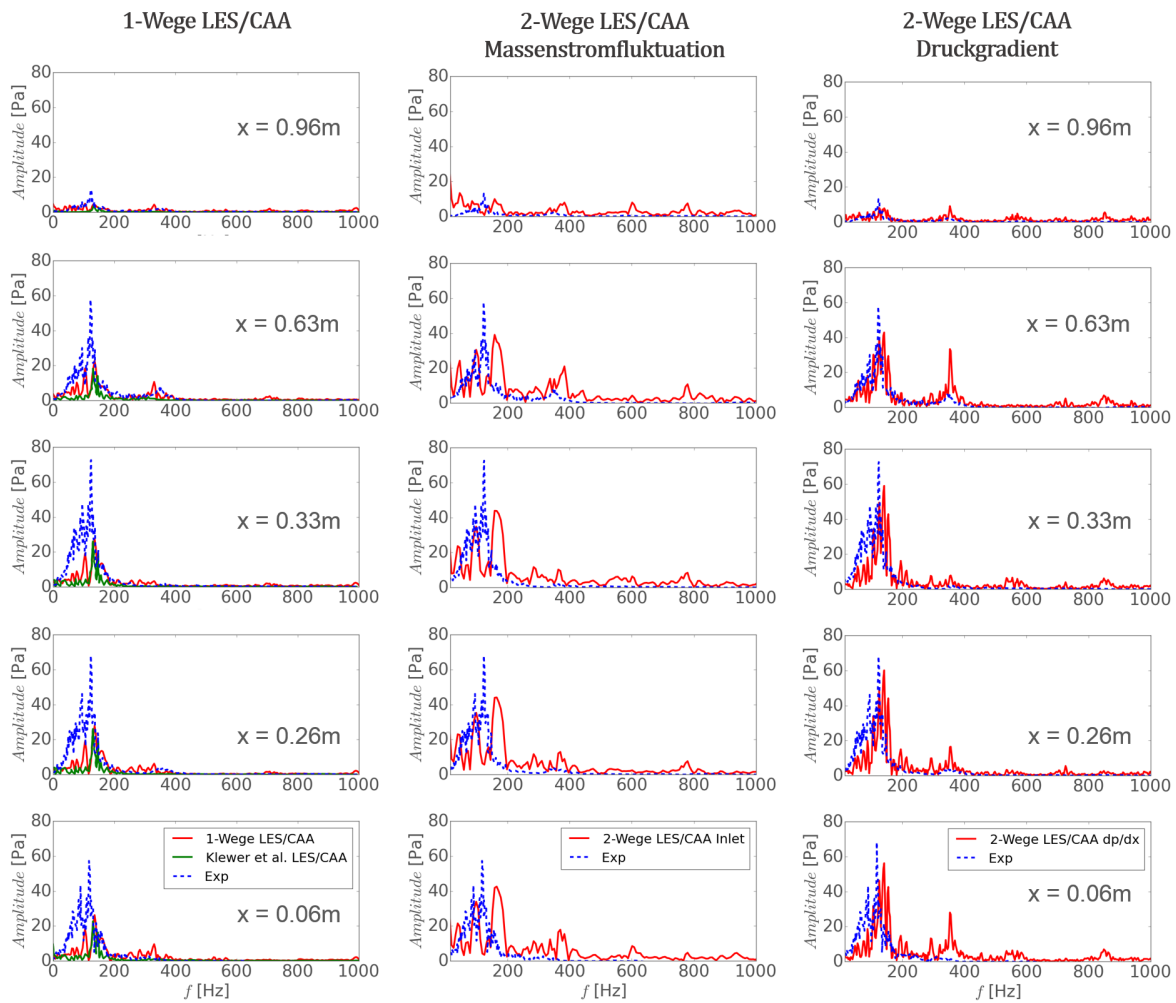


Abbildung 7.21: Vergleich der Ergebnisse der hybriden 1-Wege und 2-Wege LES/CAA Simulationen mit experimentellen Schalldruckmessungen an 5 axialen Positionen. Dargestellt sind die Ergebnisse der 1-Wege LES/CAA (links), der 2-Wege LES/CAA mit Massenstromfluktuation (mitte) und der 2-Wege LES/CAA mit zurückgekoppeltem akustischen Druckgradienten $\partial p' / \partial x_i$ (links.)

Die dominanten Frequenzen im unteren Frequenzbereich werden andeutungsweise wiedergegeben, was auch für den Bereich unterhalb von $f = 126 \text{ Hz}$ zutrifft. Im Rahmen dieser Arbeit konnte der Grund der Instabilität bei der Berechnung leider nicht genauer eingegrenzt werden. Es ist jedoch ersichtlich, dass die akustisch induzierte Massenstromschwankung bei der Vorhersage von thermoakustischen Instabilitäten von großer Bedeutung ist. Bei der Verwendung einer inkompressiblen Methode ist es nicht möglich, die konvektive Ausbreitungszeit der Massenstromschwankung wiederzugeben. Aus diesem Grund wird die akustische Ausbreitung bei der folgenden Methode durch den Akustiklöser in der Strömungssimulation überlagert. In der dritten Spalte sind die Ergebnisse der zweiten Rückkopplungsmethode dargestellt. Bei dieser Methode, die in Kapitel 5.3.2 detaillierter beschrieben ist, wird der akustische Schalldruck p' durch einen akustischen

Druckgradienten in die Implusgleichung der Strömungssimulation eingebracht, um eine lokale Geschwindigkeitsschwankung im reagierenden Strömungsfeld zu erzeugen. Die dargestellten Ergebnisse zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Lediglich ein kleiner Frequenzversatz von $\Delta f = 15 \text{ Hz}$ ist in den Ergebnissen zu erkennen. Dieser Fehler liegt möglicherweise in der Verwendung einer mittleren Schallgeschwindigkeit bei den Akustiksimulationen begründet. An der Position $x = 6 \text{ cm}$ sind bei $f = 350, 550, 850 \text{ Hz}$ höher harmonische Schwingungsmoden wiedergegeben, die in den experimentellen Daten an dieser Position nicht vorhanden sind. Andeutungsweise sind diese Frequenzen an den Positionen $x = 26 \text{ cm}$ und $x = 63 \text{ cm}$ in den experimentellen Daten zu finden, wo die Amplituden von der Simulation deutlich besser getroffen wurden. Bei den gezeigten Simulationen wurde eine physikalische Zeit von $t = 0.3 \text{ s}$ simuliert. An allen Mikrofonpositionen ist eine leichte Unterschätzung der simulierten Schalldruckamplituden zu erkennen. Die Amplituden im Bereich unterhalb von $f = 126 \text{ Hz}$ werden an den ersten drei Ebenen ebenfalls leicht unterschätzt. Anhand der Ergebnisse wurde gezeigt, dass der Mechanismus zur Entstehung von thermoakustischen Instabilitäten mit Hilfe einer hybriden 2-Wege LES/CAA Methode prinzipiell simuliert werden kann. In der vorliegenden Arbeit wurden die linearisierten Eulergleichungen zur Beschreibung der akustischen Wellenausbreitung verwendet. Wichtig zu erwähnen ist hierbei, dass die linearisierten akustischen Gleichungen theoretisch nicht in der Lage sind, den nichtlinearen Prozess der thermoakustischen Instabilitäten vollkommen zu beschreiben. Hierzu müssten die bei der vereinfachenden Linearisierung vernachlässigten nichtlinearen Terme in den Gleichungen berücksichtigt werden. Werden diese nichtlinearen Terme in den Gleichungen berücksichtigt, könnten sogenannte *limit cycle* Oszillationen berechnet werden, die sich durch eine Sättigung der Amplituden im thermoakustisch instabilen Fall auszeichnen. Durch die Verwendung einer linearen Berechnungsmethode kann jedoch, wie in dieser Arbeit gezeigt wurde, eine gute Annäherung zu den sich einstellenden Zuständen im thermoakustisch instabilen Betriebsverhalten gegeben und die Frequenzen der *limit cycle* Oszillationen vorhergesagt werden.

7.2.7 Zusammenfassung

Für die Simulation des instabilen Betriebspunktes wurden für das reagierende Strömungsfeld bessere Ergebnisse erzielt als dies mit den abgeschätzten Massenströmen bei der Simulation des stabilen Betriebspunktes der Fall war. Die Wiedergabe der Strömungsgeschwindigkeit wurde bei beiden Kopplungsmethoden gleichermaßen gut vorhergesagt. Wie bei den Vergleichen des reagierenden Strömungsfeldes bei der Simulation des stabilen Betriebspunktes wären zusätzliche Messergebnisse von skalare Größen und Fluktuationen zur erweiterten Bewertung der reagierenden Strömung wünschenswert. In der Akustiksimulation wurden für die hybride LES/CAA Simulation mit der Rückkopplung eines akustischen Druckgradienten gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Schalldruckmessungen erzielt. Die Frequenzinformationen des experimentellen Spektrums wurden von der 2-Wege LES/CAA bis auf einen kleinen Frequenzversatz gut wiedergegeben. Die Amplituden wurden überraschenderweise selbst mit der Lösung der linearisierten Eulergleichungen lediglich leicht unterschätzt. Bei den Berechnungen des instabilen Betriebspunktes der generischen Brennkammer wurden mit der in dieser Arbeit verwendeten hybriden 2-Wege LES/CAA-Methode sehr gute Ergebnisse für die Vorhersage der akustischen Eigenschaf-

ten erzielt. Hierdurch wird die Fähigkeit der vorgestellten Methode zur Berechnung des thermoakustischen Verhaltens von technischen Verbrennungssystemen bestätigt.

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde eine hybride numerische Methode entwickelt, um den Verbrennungslärm in technischen Verbrennungssystemen berechnen zu können und das Auftreten thermoakustischer Instabilitäten vorherzusagen. Das reagierende Strömungsfeld in den berechneten Verbrennungssystemen wurde hierbei mit einer inkompressiblen Grobstruktursimulation berechnet. Für die präzise Abbildung der chemischen Reaktionsprozesse der zugrundeliegenden nicht-vorgemischten Verbrennung wurde das Flamelet Generated Manifolds-Modell mit vorangenommener Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion verwendet. Für die Berechnung der akustischen Eigenschaften wurde eine etablierte Methode aus dem Bereich der Aeroakustiksimulation verwendet, welche zur Beschreibung der akustischen Wellenausbreitung einen effizienten, expliziten Ansatz zur Berechnung der linearisierten Eulergleichungen verwendet. In der hier vorgestellten Arbeit wurden die reagierende, inkompressible Grobstruktursimulation und die Akustiksimulation zu einem hybriden simultanen Berechnungsverfahren integriert, um eine effiziente, simultane, numerische Berechnung der reagierenden Strömungsfelder inklusiver ihrer akustischen Eigenschaften und Wechselwirkungen in einem eingeschlossen Verbrennungssystem zu ermöglichen. Hierzu werden aus der inkompressiblen Grobstruktursimulation neben den strömungsmechanischen Größen thermoakustischen Quellterme berechnet und an die Akustiksimulation übergeben, welche mit diesen Informationen die akustische Wellenausbreitung innerhalb des Verbrennungssystems berechnet. Die Akustiksimulation überträgt wiederum akustische Quellen an die inkompressible Grobstruktursimulation, die eine akustisch motivierte Beeinflussung auf das reagierende Strömungsfeld hervorrufen. Diese Vorgehensweise hat im Vergleich zu den sonst notwendigen kompressiblen Berechnungen des reagierenden Strömungsfeldes mit seinen akustischen Eigenschaften den Vorteil, dass durch die vorgenommene Skalenseparation zwischen den strömungsmechanischen und akustischen Längen- und Zeitskalen in den hybriden Methoden deutlich größere numerische Zeitschrittweiten verwendet werden können als dies bei der kompressiblen Vorgehensweise möglich wäre. Dieser Umstand ist hauptsächlich durch die sehr hohen Ausbreitungsgeschwindigkeiten von akustischen Wellen und der dafür notwendigen räumlichen und zeitlichen numerischen Auflösung begründet, worin zwischen der reagierenden Strömung und dem akustischen Feld eine Diskrepanz besteht. Mit der Verwendung einer hybriden Methode können aus den jeweiligen Teilgebieten die optimalen und effizientesten Verfahren für die Lösung der gegebenen Problemstellung ausgewählt werden.

In dieser Arbeit wurde das industriell verwendete CFD Berechnungsprogramm PRECISE-UNS der Firma Rolls Royce über eine Schnittstelle mit dem Aeroakustikpro-

gramm PIANO-5.5 des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt zu einem hybriden CFD/CAA Berechnungsprogramm gekoppelt. Die CFD/CAA Schnittstelle wurde für die räumliche und zeitliche Interpolation zwischen den Programmteilen optimiert und um eine Rückinterpolation des akustischen Schalldrucks sowie der Schallschnelle aus der CAA in die CFD Berechnung erweitert. Desweiteren wurde der Transport des inhomogenen Strömungsfeldes in das CAA Programm sowie die Einbringung der akustischen Schallsignale in den Strömungslöser integriert, um eine Rückkopplung der akustischen Signale auf das reagierende Strömungsfeld zu realisieren. Mit der Kopplung zwischen den beiden Berechnungsprogrammen in beide Richtungen wurde die Möglichkeit eröffnet, eine Vorhersage von thermoakustischen Instabilitäten in technischen eingeschlossenen Verbrennungssystemen zu ermöglichen.

Diese Eigenschaft der entwickelten hybriden CFD/CAA Methode wurde anhand der Berechnung von vereinfachten technischen Verbrennungssystem untersucht. Es wurden hybride Berechnung vorgestellt, bei denen die reagierenden Strömungsfelder auf Basis einer inkompressiblen, reagierenden Grobstruktursimulation berechnet wurden und die berechneten thermoakustischen Quellterme zur Berechnung der Wellenausbreitung an die Akustiksimulation übergeben wurden. Die Rechnungen wurden mit und ohne Rückkopplungsmechanismen durchgeführt und die erhaltenen Ergebnisse miteinander und mit experimentellen Daten verglichen und validiert. Die Übereinstimmungen zwischen den experimentellen Daten und den durchgeführten hybriden LES/CAA Berechnungen kann fallspezifisch als sehr gut bezeichnet werden.

In Hinblick auf zukünftige Arbeiten und der erstrebenswerten Berechnung von realitätsnahen komplexeren Verbrennungssystemen wäre ein Wechsel des hier verwendeten Akustikprogramm anzustreben. Grund hierfür ist die notwendige Verwendung von blockstrukturierten Gittern in PIANO und die verfahrensbedingte Notwendigkeit von numerisch sehr glatten Gittern aufgrund der hohen räumlichen Diskretisierungsordnung. In realen komplexen technischen Verbrennungssystemen wie beispielsweise einer Flugtriebwerksbrennkammer ist das Generieren von numerisch glatten Gittern aufgrund der komplexen geometrischen Gegebenheiten eine herausfordernde Aufgabe. Hierbei sind numerische Verfahren, die auf einer unstrukturierten Formulierung basieren, wie dies beispielsweise in dem verwendeten Strömungslöser PRECISE-UNS der Fall ist, klar zu bevorzugen. Für die Vorhersage der thermoakustischen Instabilitäten und dem hier nicht abbildbaren akustischen Sättigungsbereich im *limit cycle* wäre eine Erweiterung der linearisierten akustischen Gleichungsansätze mit nichtlinearen Komponenten wünschenswert.

Literaturverzeichnis

- [1] AKSEL, SPURK: *Strömungslehre Einführung in die Theorie der Strömungen*, Band 6. Springer Verlag, 2005.
- [2] ANAND, M.S., R. EGGELS, M. STAUFER, M. ZEDDA und J. ZHU: *An advanced unstructured-grid finite-volume design system for gas turbine combustion analysis*. Proceedings of ASME 2013 Gas Turbine India Conference, Bangalore, Karnataka, India, GTINDIA2013-3537, 2013.
- [3] ANGELBERGER, C., D. VEYNANTE und F. EGOLFOPOULOS: *LES of Chemical and Acoustic Forcing of a Premixed Dump Combustor*. Flow, Turb. Combust., 65:205–222, 2000.
- [4] ANSYS INC.: *ANSYS ICEM CFD 14*. Technischer Bericht, 2014.
- [5] ASCHMONEIT, K.: *Numerische Beschreibung technischer Verbrennungssysteme*, Band 1. Auflage. Optimus Mostafa Verlag, 2013.
- [6] BARLOW, R. (Herausgeber): *Proceedings of the TNF Workshops*, Livermore, CA, 1996-2010. Sandia National Laboratories. www.ca.sandia.gov/TNF.
- [7] BEYER, R.T.: *Sounds of Our Times*. Springer-Verlag, 1998.
- [8] BP UK: *BP Energy Outlook 2016 edition*. Technischer Bericht, 2016.
- [9] BRAGG, S. L.: *Combustion Noise*. J. Inst. Fuel, 36:12–16, 1963.
- [10] BRÄUNLING, W.J.: *Flugzeugtriebwerke*, Band 3. Vollst. überarbeitet und erweiterte Auflage. Springer Verlag, 2009.
- [11] BRICK, H., R. PISCOYA, M. OCHMANN und P. KÖLTZSCH: *Modelling of Combustion Noise with the Boundary Element Method and Equivalent Source Method*. In: *33rd Int. Congress and Exposition on Noise Control: Inter Noise 2004*, 2004. Prag, Tschechische Republik.
- [12] BRICK, H.R. AND PISCOYA, M. AND OCHMANN AND KÖLTZSCH, P.: *Prediction of the sound radiation from open flames by coupling a large eddy simulation and a kirchhoff-method*. Acta Acustica united with Acustica, 91:17–21, 2005.
- [13] BRONSTEIN, I.N., H. MÜHLIG, G. MUSIOL und A.K. SEMENDJAJEW: *Taschenbuch der Mathematik*, Band 6. Auflage. Verlag Harri Deutsch, 2005.
- [14] BUI, T.P.: *Theoretical and Numerical Analysis of Broadband Combustion Noise*. Doktorarbeit, RWTH Aachen, 2008.
- [15] BUI, T.P., M. IHME, M. MEINKE, W. SCHROEDER und H. PITSCH: *Numerical Investigation of Combustion Noise and Sound Source Mechanisms in a Non-premixed flame using LES and APE-RF*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2007.
- [16] BUI, T.P., M. MEINKE, W. SCHRÖDER, F. FLEMMING, A. SADIKI und J. JANICKA: *A Hybrid Method for Combustion Noise Based on LES and APE*. In: *11th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*, Monterey, CA, USA, Mai 2005. AIAA-2005-3014.
- [17] BUI, T.P., W. SCHRÖDER und M. MEINKE: *Numerical Analysis of the Acoustic Field of Reacting Flows via Acoustic Perturbation Equations*. Computers and Fluids, 37:1157–1169, 2008.
- [18] CANDEL, S.: *Combustion Dynamics and Control: Progress and Challenges*. Proc. Combust. Inst., 29:1–28, 2002.

- [19] CHAKRAVARTHY, S. A., O. J. SHREENIVASAN, B. BÖHM, A. DREIZLER und J. JANICKA: *Experimental characterization of onset of acoustic instability in a nonpremixed half-dump combustor*. J. Acoust. Soc. Am., 74:120–127, 2007.
- [20] CHEM1D, TECHNISCHE UNIVERSITÄT EINDHOVEN: *Chem1D: A one-dimensional detailed chemistry code*. <http://www.combustion.tue.nl/chem1d>, 2014.
- [21] CHIU, H.H. und M. SUMMERFIELD: *Theory of combustion noise*. Acta Astronautica, 1, 1974.
- [22] CRIGHTON, D. G., A. DOWLING, J. FFWCS WILLIAMS, M. HECKL und F. LEPPINGTON: *Modern Methods in Analytical Acoustics*. Springer Verlag, 1992.
- [23] CROCCO, L. und S.I. CHENG: *Theory of Combustion Instability in Liquid Propellant Rocket Motors*. Butterworths Scientific Publications, 1956.
- [24] DEC, J.E. und J.O. KELLER: *Pulse Combustor tail pipe heat transfer dependence on frequency, amplitude, and mean flow rate*. Combustion and Flame, 77((3-4)):359–374, 1989.
- [25] DEC, J.E. und J.O. KELLER: *Time resolved gas temperature in the oscillating turbulent flow of a pulse combustor tail pipe*. Combustion and Flame, 80((3-4)):358–370, 1990.
- [26] DOWLING, A.P.: *Modelling and Control of Combustion Oscillations*. IGTI/ASME GT2005-68452, 2005.
- [27] DOWLING, A.P. und Y. MAHMOUDI: *Combustion Noise*. Proceedings of the Combustion Institute, 35(1):65–100, 2015.
- [28] DUCRUIX, S., T. SCHULLER, D. DUROX und S. CANDEL: *Combustion Instability Mechanisms in Premixed Combustors*. American Institute of Aeronautics and Astronautics AIAA, 2005.
- [29] DUWIG, C., B. GHERMAN, M. MIHAESCU und M. SALEWSKI: *Numerical study of thermo-acoustic waves generation by swirling flame using a new approach based on large eddy simulation*. ASME Turbo Expo 2005, 2:67–75, 2005. Paper No. GT2005-68135.
- [30] ECKSTEIN, J., E. FREITAG, C. HIRSCH und T. SATTELMEYER: *Experimental Study on the Role of Entropy Waves in Low-Frequency Oscillations for a Diffusion Burner*. IGTI/ASME GT2004-54163, 2004.
- [31] EHRENFRIED, K.: *Strömungsakustik, Skript zur Vorlesung*. Mensch und Buch Verlag, 2004.
- [32] FAVRE, A.: *Statistical equations of turbulent gases*. Problems of hydrodynamics and continuum mechanics, Seiten 231–266, 1969.
- [33] FFWCS WILLIAMS, J.E. und D.L. HAWKINGS: *Sound Generated by Turbulence and Surfaces in Arbitrary Motion*. Philosophical Transactions of the Royal Society, A264:321–342, 1969.
- [34] FIORINA, B., R. BARON, O. GICQUEL, D. THÉVENIN, S. CARPENTIER und N. DARABIHA: *Modeling non-adiabatic partially premixed flames using flame prolongation of ILDM*. Combustion Theory and Modeling, 7:449–470, 2003.
- [35] FIORINA, B., O. GICQUEL, L. VERVISCH, S. CARPENTIER und N. DARABIHA: *Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation*. Combustion and Flame, 140:147–160, 2005.
- [36] FLEMMING, F.: *On the Simulation of Noise Emissions by Turbulent Non-Premixed Flames*. Dissertation, TU Darmstadt, 2007.
- [37] FLEMMING, F., A. NAUERT, A. SADIKI, J. JANICKA, H. BRICK, R. PISCOYA, M. OCHMANN und P. KÖLTZSCH: *A Hybrid Approach for the Evaluation of the Radiated Noise from a Turbulent Non-premixed Jet Flame Based on Large Eddy Simulation and Equivalent Source & Boundary Element Methods*. In: 12th International Congress on Sound and Vibration, Lisbon, Portugal, Juli 2005.
- [38] FLEMMING, F., A. SADIKI und J. JANICKA: *Investigation of Combustion Noise Using a LES/CAA Hybrid Approach*. Proc. Combust. Inst., 31:3189–3196, 2007.

-
- [39] FORKEL, H.: *Über die Grobstruktursimulation turbulenter Wasserstoff-Diffusionsflammen*, Band Reihe 6 Nr.428. VDI Verlag GmbH Düsseldorf, 2000.
- [40] FORKEL, H. und J. JANICKA: *Large Eddy Simulation of a Turbulent Hydrogen Diffusion Flame*. Flow, Turb. Combust., 65:163–175, 2000.
- [41] FORUM, MESSAGE PASSING INTERFACE: *Message Passing Interface*. <http://www.mpi-forum.org>, Zugriff 2012, 2012.
- [42] FOUQUET, D. und J.V. NYSTEN: *The future role of renewables in Europe*. International Journal for Electricity and Heat Generation VGB Powertech, 2(1):22–23, 2016.
- [43] FRÖHLICH, J.: *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner Verlag, 2006.
- [44] GERMANO, M., U. PIOMELLI, P. MOIN und W.H. CABOT: *A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model*. Physics of Fluids, A3:1760–1765, 1991.
- [45] GICQUEL, O, N. DARABIHA und D THÉVENIN: *Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion*. Proceedings of the Combustion Institute, 28:1901–1908, 2000.
- [46] GRIMM, F., R. EWERT, J. DIERKE, G REICHLING, B. NOLL und M AIGNER: *Efficient Combustion Noise Simulation of a Gas Turbine Model Combustor Based on Stochastic Sound Sources*. In: *ASME Turbo Expo 2015, Power for Land, Sea and Air, GT2015-42390*, 2015.
- [47] HARTEN, A.: *High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws*. Journal of Computational Physics, 49:357–393, 1983.
- [48] HEDGE, U.G., D. REUTER, B.R. DANIEL und B.T. ZINN: *Flame Driving of Longitudinal Instabilities in Dump Type Ramjet Combustors*. Combustion Science and Technology, 55:125–138, 1987.
- [49] HIRSCH, C., J. WASLE, A. WINKLER und T. SATTELMAYER: *A spectral model for the sound pressure from turbulent premixed combustion*. Proceedings of the Combustion Institute, 31(1):1435–1441, 2007.
- [50] HU, F.Q., M.Y. HUSSAINI und J.L. MANTHEY: *Low-Dissipation and Low-Dispersion Runge-Kutta Schemes for Computational Acoustics*. J. Comput. Physics, 124:177–191, 1996.
- [51] HUANG, Y., H-G. SUNG, S-Y. HSIEH und V. YANG: *Large Eddy Simulation of Combustion Dynamics of Lean-Premixed swirl stabilized Combustor*. Journal of Propulsion and Power, 19(5):782–794, 2003.
- [52] IHME, M., H. PITTSCH und M. KALTENBACHER: *Prediction of Combustion-generated Noise in Non-premixed Turbulent Jet Flames using Large Eddy Simulation*. In: *5th US Combustion Meeting*, San Diego, CA, USA, 2007.
- [53] JANICKA, J. und W. KOLLMANN: *A Two - Variables Formalism for the Treatment of Chemical Reactions in turbulent H₂ Air Diffusion Flames*. Proceedings of Combustion Institute, 17:421–430, 1978.
- [54] JANICKA, J. und A. SADIKI: *Large eddy Simulation of turbulent combustion systems*. Proceedings of Combustion Institute, 30:537–547, 2005.
- [55] JASAK, H., H.G. WELLER und A.D. GOSMAN: *High resolution NVD differencing scheme for arbitrary unstructured meshes*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 31:431–449, 1999.
- [56] JOOS, F.: *Technische Verbrennung*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [57] KELLER, J.O. AND BRAMLETTE, T.T., P.K. BARR und J.A. ALVAREZ: *NO_x and CO Emissions from a pulse combustor operating in a lean premixed mode*. Combustion and Flame, 99((3-4)):460–466, 1994.

- [58] KEMPF, A.: *Large-Eddy Simulation of Non-Premixed Turbulent Flames*. Dissertation, TU Darmstadt, 2003.
- [59] KENDRICK, D.W., T.J. ANDERSON und W.A. SOWA: *Acoustic Sensitivities of Lean-Premixed Fuel Injectors in a Single Nozzle Rig*. American Society of Mechanical Engineers ASME Turbo Expo, Paper 98-GT-382, 1998.
- [60] KETELHEUN, A.: *Applikation und Untersuchung der Flamelet Generated Manifolds Theorie im Hinblick auf Mischungbrüche außerhalb der Zündgrenzen*, 2008.
- [61] KETELHEUN, A., C. OLBRICHT, F. HAHN und J. JANICKA: *Premixed Generated Manifolds Aiming On The Computation of gas Turbine Combustion*. In: *ASME Turbo Expo*, 2009. GT2009-59940, Orlando, FL, USA.
- [62] KLEIN, S.A. und J.B.W. KOK: *Sound Generation by Turbulent Non premixed Flames*. Combustion Science and Technology, 149(1):267–295, 2003.
- [63] KLEWER, C.: *Numerische Berechnung von Verbrennungsl.* Doktorarbeit.
- [64] KLEWER, C., F. HAHN, C. OLBRICHT und J. JANICKA: *Hybrid LES/CAA Simulation of a Turbulent Non-Premixed Jet Flame*. Nummer 7, Trieste, Italy, 2008.
- [65] KOLMOGOROV, A.N.: *Local Structure of Turbulence in an Incompressible Viscous Fluid at Very High Reynolds Numbers*. Dokl. Akad. Nauk SSSR, 30:299–303, 1941.
- [66] KOTAKE, S.: *On combustion noise related to chemical reactions*. J. Sound Vibration, 42(3):399–410, 1975.
- [67] KOTAKE, S. und K. HATTA: *On the noise of diffusion flames*. Japan Society of Mechanical Engineers Journal, 8(30):211–219, 1965.
- [68] KREBS, W., S. BETHKE, J. LEPERS, P. FLOHR, C. JOHNSON und S. SATTINGER: *Thermoacoustic Design Tools and Passive Control: Siemens Power Generation Approaches*. ASME Turbo Expo, 2004.
- [69] KÜHNE, J.: *Analysis of Combustion LES using an Eulerian Monte Carlo PDF Method*. Doktorarbeit, Technische Universität Darmstadt, 2011.
- [70] LANDENFELD, T., A. SADICKI und J. JANICKA: *A Turbulence-Chemistry Interaction Based on a Multivariate Presumed beta-PDF Method for turbulent Flames*. Flow, Turbulent Combustion, 68:111–135, 2002.
- [71] LAVERDANT, A. und D. THÉVENIN: *Interaction of a Gaussian acoustic wave with a turbulent premixed flame*. Combust. Flame, 134(1–2):11–19, 2003.
- [72] LEONARD, A.: *Energy cascade in Large-eddy Simulations of Turbulent Fluid Flows*. Advances in Geophysics, 18:237–248, 1975.
- [73] LERCH, R., G. SESSLER und D. WOLF: *Technische Akustik*, Band 1. Auflage. Springer Verlag, 2009.
- [74] LIEUWEN, T. H. TORRES, C. JOHNSON und B.T. ZINN: *A Mechanism of Combustion Instability in Lean Premixed Gas Turbine Combustors*. ASME Turbo Expo Paper 99-GT-3, 1999.
- [75] LIGHTHILL, M. J.: *On sound generated aerodynamically: I. General theory*. Proc. Roy. Soc. A, 211:564–587, 1952.
- [76] LIGHTHILL, M. J.: *On sound generated aerodynamically: II. Turbulence as a source of sound*. Proc. Roy. Soc. A, 222(1148):1–32, 1954.
- [77] LILLY, D.K.: *A Proposed Modification of The Germano Subgrid-Scale Closure Model*. Phys. Fluids A, 4:633–635, 1992.
- [78] LYRINTZIS, A.S.: *Integral Methods in Computational Aeroacoustics From the (CFD) near-field to the (acoustic) far-field*. International Journal of Aeroacoustics, (2):95–128, 2003.

-
- [79] MARBLE, F.E. und S.M. CANDEL: *Acoustic Disturbance from Gas Non-Uniformities Convected through a Nozzle*. Journal of Sound and Vibration, 55:225–243, 1977.
- [80] MECHEL, F.: *Formulas of Acoustic*, Band 2nd Edition. Springer Verlag, 2008.
- [81] MENON, S., C. STONE, V. SANKARAN und B. SEKAR: *Large Eddy Simulation of Combustion in Gas Turbine Combustors*. AIAA paper, Seiten 00–0960, 2000.
- [82] MÖSER, M.: *Technische Akustik*, Band 8th Edition. Springer Verlag, 2009.
- [83] MÜHLBAUER, B., R. EWERT, O. KORNOW, B. BOYDE, B. NOLL, J.W. DELFS und M. AIGNER: *Evaluation of the RPM-CN approach for broadband combustion noise prediction*. Nummer 47, AIAA-2009-3285, 2009.
- [84] NICOD, F. und F. DUCROS: *Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor*. Flow, Turbulence and Combustion, 62:183–200, 1999.
- [85] OIJEN, J.A. VAN und L.P.H. DE GOEY: *Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds*. Combustion Science and Technology, 161:113–137, 2000.
- [86] PASCHEREIT, C.O., E. GUTMARK und W. WEISENSTEIN: *Structure and Control of Thermoacoustic Instabilities in a Gas-turbine Combustor*. Combustion and Science and Technology, 138(1-6):213–232, 1998.
- [87] PERIC, J.H. FERZIGER M.: *Numerische Strömungsmechanik*. Springer Verlag, 2008.
- [88] PFUDERER, D.G., A.A. NEUBER, G. FRÜCHTEL, E.P. HASSEL und J. JANICKA: *Turbulence modulation in jet diffusion flames: Modeling and experiments*. Combust. Flame, 106:307–317, 1996.
- [89] PHILLIPS, O.M.: *On the Generation of Sound by Supersonic Turbulent Shear Layers*. J. Fluid Mech., 9:1–28, 1960.
- [90] PISCOYA, R., M. OCHMANN, H. BRICK und P. KÖLTZSCH: *Modelling of the Combustion Noise by Means of the Equivalent Source Method (ESM)*. In: *Proc. Joint Congress CFA/DAGA'04*, 2004. Straßburg, Frankreich.
- [91] POINSOT, T. und D. VEYNANTE: *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, Inc, Philadelphia, USA, 2001.
- [92] POINSOT, T. und D. VEYNANTE: *Theoretical and Numerical Combustion*, Band 2nd Edition. R.T. Edwards, Inc, Philadelphia, USA, 2005.
- [93] POLIFKE, W., C. PASCHEREIT und K. DÖBBELING: *Constructive and Destructive Interference of Acoustic and Entropy Waves in a Premixed Combustor with a Choked Exit*. International Journal of Acoustic and Vibration, 6:135–146, 2001.
- [94] POPE, S.B.: *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- [95] RAYLEIGH, J.W.S.: *The Explanation of Certain Acoustical Phenomena*. Nature, 18:319–321, 1878.
- [96] REYNOLDS, O.: *An Experimental Investigation of the Circumstances which Determine whether the Motion of water shall be Direct or Sinuous, and of the Law of Resistance in Parallel Channels*. Philosophical Transactions of the royal Society of London, 174:935–982, 1883.
- [97] RIBNER, H.S.: *Effect of jet flow on jet noise via an extension to the Lighthill model*. Journal of Fluid Mechanics, 321:1–24, 1996.
- [98] RICHARDSON, L.F.: *Weather Prediction by Numerical Process*, Band 2nd Edition. Cambridge University Press, 2007.
- [99] ROUX, S., G. LARTIGUE, T. POINSOT, U. MEIER und C. BERAT: *Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiments, acoustic analysis, and large eddy simulations*. Combustion and Flame, 141:40–54, 2005.

- [100] SCHADOW, K. und E. GUTMARK: *Combustion Instability Related to Vortex Shedding in Dump Combustors and Their Passive Control*. Progress in Energy and Combustion Science, 18:117–132, 1992.
- [101] SCHÄFER, M.: *Computational Engineering Introduction to Numerical Methods*. Springer Verlag, 2006.
- [102] SCHUMANN, H.: *Subgrid Scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli*. Journal of Computational Physics, 18:376–404, 1975.
- [103] SHANG, J.S.: *High-order compact-difference schemes for time-dependent Maxwell equations*. Journal of Computational Physics, 153:312–333, 1999.
- [104] SHEPARD, D.: *A two-dimensional interpolation function for irregularly-spaced data*. In: *Proceedings of the 23rd ACM national conference*, 1968. 517–524.
- [105] SHIH, W. und D.A. LEE, J.G. AND SANTAVICCA: *Stability and Emissions Characteristics of A Lean Premixed Gas Turbine Combustor*. Proc. Combust. Inst., 26:2271–2278, 1996.
- [106] SHREENIVASAN, O.J.: *Onset of Acoustic Instability by Vortex Shedding in a Non-premixed Dump Combustor*. Dissertation, Indian Institute of Technology Madras, 2009.
- [107] SHVAB, V.A.: *Relation between the temperature and velocity fields of the flame of a gas burner*. Gos. Energ. Izd. Moscow-Leningrad, 1948.
- [108] SINGH, K.K., S.H. FRANKEL und J.P. GORE: *Effects of combustion on the sound pressure generated by circular jet flows*. AIAA, 41(2):319–321, 2003.
- [109] SINGH, K.K., S.H. FRANKEL und J.P. GORE: *Study of spectral noise emissions from standard turbulent nonpremixed flames*. AIAA, 42(5):931–936, 2004.
- [110] SMAGORINSKY, J.: *General circulation experiments with the primitive equations I. The basic experiment*. Monthly Weather Rev., 91:99–164, 1963.
- [111] SMITH, G.P.S., D.M. GOLDEN, M. FRENKLACH, N.W. MORIARTY, B. EITENEER, M. GOLDBERG, C.T. BOWMAN, R.K. HANSON, S. SONG, C. GARDINER, V.V. LISSIANSKI und Z. QIN: *GRI-Mech 3.0* <http://www.me.berkeley.edu/grimech/>, 2014.
- [112] SMITH, T.J.B und J.K. KILHAM: *Noise generation by open turbulent flames*. Journal of the Acoustical Society of America, 35(5):715–724, 1963.
- [113] STRAHLE, W. C.: *On combustion generated noise*. J. Fluid Mech., 49(2):399–414, 1971.
- [114] STRAHLE, W. C.: *Some results in combustion generated noise*. J. Sound Vibration, 23(1):113–125, 1972.
- [115] STRAHLE, W. C.: *Combustion Noise*. Prog. Energy Combust. Sci., 4(3):157–176, 1978.
- [116] TACKE, M.M., D. GEYER, E.P. HASSEL und J. JANICKA: *A detailed investigation of the stabilized point of lifted turbulent diffusion flames*. Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 27:1157–1165, 1998.
- [117] TAM, C. K. W.: *Jet Noise: Since 1952*. Theoret. Comput. Fluid Dynamics, 10:393–405, 1998.
- [118] TAM, C. K. W. und J. C. WEBB: *Dispersion-Relation-Preserving Finite Difference Schemes for Computational Acoustics*. J. Comput. Physics, 107:262–281, 1992.
- [119] TAM, C.K.W. und Z. DONG: *Wall Boundary Conditions for High-Order Finite-Difference Schemes in Computational Aeroacoustics*. Theor. Comp. Fluid Dynamics, 6:303–322, 1994.
- [120] THOMAS, A. und G.T. WILLIAMS: *Flame Noise Sound emission from Spark-Ignited Bubbles of Combustible Gas*. Proceedings of the Royal Society of London Series A, 294:449–466, 1966.
- [121] TRUFFAUT, J.M, G. SEARBY und L. BOYER: *Sound emission by non-isomolar combustion at low Mach numbers*. Combustion Theory Modelling, 2:423–428, 1998.

- [122] VASILYEV, O.V., T.S. LUND und P. MOIN: *A general class of commutative filters for LES in complex geometries*. Journal of Computational Physics, 146:82–104, 1998.
- [123] WARNATZ, J., U. MAAS und R.W. DIBBLE: *Verbrennung*. Springer Verlag, 2001.
- [124] WILLIAMS, F.A.: *Recent Advances in Theroretical Descriptions of Turbulent Diffusion Flames*. In: *Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows*, 1975. Plenum Press, New York.
- [125] WILLIAMS, F.A.: *Combustion Theory. The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems*. Addison-Wesley, 1964.
- [126] WILLIAMS, F.A.: *Combustion Theory*, Band 2nd edition. The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., Menlo Park, California, 1985.
- [127] ZEL'DOVICH, Y.B.: *On the theory of combustion of initially unmixed gases*. Zhur. Tekhn. Fiz., 19:1199, 1949.

Lebenslauf

| | |
|-----------------------------------|---|
| Name | Timo Christian Klenke |
| Geburtsdatum | 10. Oktober 1981 |
| Geburtsort | Kassel |
| Schulbildung | 08/1999 – 06/2002 Max-Eyth Schule Kassel Allgemeine Hochschulreife |
| Zivildienst | 07/2002 – 04/2003 Arbeiterwohlfahrt Baunatal |
| Studium | 04/2003 – 08/2011 Technische Universität Darmstadt Fachrichtung: Allgemeiner Maschinenbau Vertiefungen: Energietechnik, Thermodynamik, Strömungen, Verbrennung, Computational Fluid Dynamics CFD, Computational Aero Acoustic CAA 08/2007 Vordiplom 09/2008 – 07/2009 Technische Universität Wien, Erasmus 08/2011 Abschluss zum Dipl.-Ing. |
| Wissenschaftlicher Mitarbeiter | seit 09/2011 Technische Universität Darmstadt Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik (EKT) |